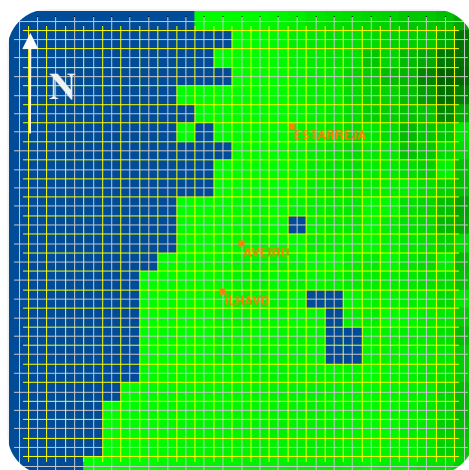




**Paulo Manuel
Botelho Tavares
de Sousa**

Simulação da qualidade do ar para Portugal com o modelo TAPM





**Paulo Manuel
Botelho Tavares
de Sousa**

**Simulação da qualidade do ar para Portugal com o
modelo TAPM**

Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Engenharia do Ambiente, realizada sob a orientação científica da Doutora Ana Isabel Miranda, Professora Associada do Departamento de Ambiente e Ordenamento da Universidade de Aveiro.

Para a Joana, Leonilde, Manuel e Nuno

o júri

presidente

Prof. Dr. Casimiro Adrião Pio

Professor Catedrático do Departamento de Ambiente e Ordenamento da Universidade de Aveiro

Prof. Dra. Ana Isabel Couto Neto da Silva Miranda

Professora Associada do Departamento de Ambiente e Ordenamento da Universidade de Aveiro

Prof. Dr. Manuel Joaquim Sabença Feliciano

Professor equiparado a Assistente na Escola Superior Agrária de Bragança do Instituto Politécnico de Bragança

agradecimentos

Os meus sinceros agradecimentos vão para todos aqueles que, de alguma maneira, contribuíram para a realização do presente trabalho, nomeadamente:

À Professora Doutora Ana Isabel Miranda, pela orientação e apoio.

À Doutora Alexandra Monteiro pela ajuda e dados fornecidos.

Aos meus pais e irmão pelo apoio incondicional.

À Joana, por tudo...

palavras-chave

qualidade do ar, monitorização, modelação, poluentes, *ensembling*, simulações, comparação

resumo

A preocupação das populações com a qualidade do ar que se respira e também com o desenvolvimento sustentável, confere aos estudos sobre qualidade do ar uma importância acrescida.

Para a realização destes estudos, recorre-se muitas vezes a ferramentas numéricas de modelação. A modelação é largamente usada no controle e gestão da qualidade do ar, no entanto, e dado que a modelação é uma previsão, acarreta vários erros que têm grande influência na correcta previsão da dispersão de poluentes.

De modo a criar uma maior fiabilidade na modelação, têm vindo a ser desenvolvidas novas formas de abordagem que permitam conferir-lhe uma robustez superior, como é o caso do *Ensembling*, um método em que, fazendo a análise simultânea de diferentes simulações obtidas com diferentes modelos, se obtém um grupo de resultados mais conciso, que inclui os pontos fortes de cada modelo em prever um determinado cenário.

Neste estudo, através do uso do modelo meteorológico e de qualidade do ar The Air Pollution Model (TAPM) e de uma série extensa de dados meteorológicos e de poluição de várias estações de monitorização da zona de Aveiro, efectuou-se uma avaliação baseada no conceito de *Ensembling*.

Foi possível concluir que os resultados provenientes do *Ensembling*, quando comparados com os de simulações individuais, apresentam um comportamento muito razoável, fazendo desta técnica uma ferramenta útil para auxiliar a avaliação e gestão da qualidade do ar, através da minimização de erros associados à previsão da dispersão de poluentes.

keywords

air quality, monitoring, modeling, pollutants, *ensembling*, simulations, comparison

abstract

The growing environmental concern of the world's population about the air quality and also about the sustainable development enhances the importance of the studies about air quality.

For the creation of these studies, numerical tools of modeling are very often used. Modeling is a very powerful tool, widely used for the evaluation and control of air quality, nevertheless, as it is a prevision tool, is not always totally accurate, and may produce errors that affect the correct prevision of pollutant emissions.

In order to grant modelling a superior precision, new ways of approach have been developed, as the *Ensembling*, a technic in which the simultaneous analysis of the results of different simulations, obtained through different models, gives more concise results, which include the strong points of each model in predicting a given scenario.

In this study, through the use of the meteorological and air quality model The Air Pollution Model (TAPM) and of a large extent of meteorological and pollution data obtained from monitoring stations from the Aveiro area, an approximation to *Ensembling* has been done.

It was possible to conclude that the results provided by the *Ensembling* presented more accurate results, when compared with individual simulations, have a very reasonable behavior, proving this technic is a useful tool for the evaluation and control of air quality, through the minimization of errors associated to the prediction of pollutant dispersion.

ÍNDICE

1. INTRODUÇÃO	1
2. A QUALIDADE DO AR	4
2.1. MATÉRIA PARTICULADA	7
2.2. ÓXIDOS DE AZOTO	8
2.3. OZONO.....	9
3. A MODELAÇÃO DA QUALIDADE DO AR.....	11
3.1. O MODELO TAPM	11
3.2. O ENSEMBLING	20
4. CASO DE ESTUDO.....	26
4.1. CONDIÇÕES DE SIMULAÇÃO	26
4.1.1. <i>Domínio de Simulação</i>	26
4.1.2. <i>Emissões</i>	29
4.1.3. <i>Aplicação do TAPM</i>	31
4.2. COMPONENTE DE METEOROLOGIA.....	32
4.2.1. <i>Comparação de Temperaturas</i>	35
4.2.2. <i>Comparação de Ventos</i>	39
4.2.3. <i>Validação da Corrida Anual Completa de Meteorologia</i>	44
5. RESULTADOS.....	47
5.1. COMPONENTE DE POLUIÇÃO ATMOSFÉRICA	47
5.1.1. <i>Partículas</i>	51
5.1.2. <i>Ozono</i>	53
5.1.3. <i>NO₂</i>	55
5.1.4. <i>NO_x</i>	57
5.2. COMPARAÇÃO COM A LEGISLAÇÃO	58
5.2.1. <i>Partículas</i>	58
5.2.2. <i>Ozono</i>	59
5.2.3. <i>NO₂</i>	60
5.2.4. <i>NO_x</i>	60
6. CONCLUSÕES	61
7. REFERÊNCIAS.....	64
8. ANEXOS.....	70

Lista de Tabelas

Tabela 1 – Legislação Comunitária e Nacional relativa à qualidade do ar.....	6
Tabela 2 - Resumo do Decreto-Lei nº 111/2002 de 16 de Abril.....	7
Tabela 3- Resumo do Decreto-Lei nº 320/2003 de 20 de Dezembro	7
Tabela 4 – Dados de entrada e saída do TAPM.....	14
Tabela 5 – Reacções consideradas no mecanismo fotoquímico “generic reaction set” (GRS)	18
Tabela 6 – Gama de valores possíveis e valores óptimos dos parâmetros estatísticos (Hirdman, 2006).....	34
Tabela 7 - Simulações de Meteorologia e definições iniciais utilizadas.....	35
Tabela 8 – IOA entre os resultados das simulações e os valores medidos de temperatura.....	36
Tabela 9 – RMSE entre os resultados das simulações mensais e os valores medidos de temperatura	36
Tabela 10 – SKILL _R entre os resultados das simulações mensais e os valores medidos de temperatura	36
Tabela 11 - Correlação entre os resultados das simulações mensais e os valores medidos de temperatura	36
Tabela 12 – IOA entre os resultados das simulações e os valores medidos de velocidade do vento.....	39
Tabela 13 – RMSE entre os resultados das simulações e os valores medidos de velocidade do vento	39
Tabela 14 - SKILL _R entre os resultados das simulações e os valores medidos de velocidade do vento	39
Tabela 15 - Correlação entre os resultados das simulações e os valores medidos de velocidade do vento	40
Tabela 16 – IOA entre os resultados das simulações e os valores medidos de direcção do vento	42
Tabela 17 - RMSE entre os resultados das simulações e os valores medidos de direcção do vento	42
Tabela 18 - SKILL _R entre os resultados das simulações e os valores medidos de direcção do vento	42
Tabela 19 - Correlação entre os resultados das simulações e os valores medidos de direcção do vento.....	42
Tabela 20 – Comparação entre os valores de Temperatura (°C) obtidos pelo TAPM e os medidos.....	45
Tabela 21 – Comparação entre os valores de Velocidade do vento (m.s ⁻¹) obtidos pelo TAPM e os medidos.....	45
Tabela 22 – Comparação entre os valores de Direcção do vento (graus) obtidos pelo TAPM e os valores medidos	45
Tabela 23 - Simulações de Poluição e definições iniciais utilizadas	47
Tabela 24 - Gama de valores possíveis e valores óptimos dos parâmetros estatísticos	49
Tabela 25 – Número total de dados e respectivas percentagens	50
Tabela 26 – Comparação entre os valores de Partículas obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Aveiro	51
Tabela 27 - Comparação entre os valores de Partículas obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Estarreja.....	52
Tabela 28 - Comparação entre os valores de Partículas obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Ílhavo.....	52
Tabela 29 - Comparação entre os valores de Ozono obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Estarreja.....	53
Tabela 30 - Comparação entre os valores de Ozono obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Ílhavo.....	54
Tabela 31 - Comparação entre os valores de NO ₂ obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Aveiro.....	55
Tabela 32 - Comparação entre os valores de NO ₂ obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Estarreja.....	55
Tabela 33 - Comparação entre os valores de NO ₂ obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Ílhavo.....	56
Tabela 34 - Comparação entre os valores de NO _x obtidos pelo TAPM e os valores reais da estação de Aveiro	57
Tabela 35 - Comparação entre os valores de NO _x obtidos pelo TAPM e os valores reais da estação de Estarreja.....	57
Tabela 36 - Comparação entre os valores de NO _x obtidos pelo TAPM e os valores reais da estação de Ílhavo	58
Tabela 37 – Número de dias com excedências ao Valor-Limite diário de partículas para protecção da saúde humana	58
Tabela 38 – Média anual de partículas (µg/m ³).....	59
Tabela 39 – Número de excedências ao limiar de informação	59
Tabela 40 – Número de excedências ao limiar de alerta	59
Tabela 41 - Valor limite horário para protecção da saúde humana	60

Tabela 42 – Média anual de NO ₂ (µg/m ³)	60
Tabela 43 – Média anual de NO _x (µg/m ³).....	60

Lista de Figuras

Figura 1 – Representação esquemática do Modelo TAPM (adaptação de Ribeiro, 2005)	12
Figura 2 – Representação esquemática de 5 tipos de <i>Ensembling</i> (adaptação de Galmarini <i>et al</i> , 2004).....	24
Figura 3 – Domínio de Simulação 1200 km x 1200 km.....	26
Figura 4 – Domínio de Simulação 720 km x 720 km.....	28
Figura 5 – Domínio de Simulação 192 km x 192 km.....	28
Figura 6 – Domínio de Simulação 48 km x 48 km.....	29
Figura 7 – Grelha de emissões usada para as Simulações	30
Figura 8 – Fluxograma da metodologia usada.....	32
Figura 9 – Comparação entre a Simulação SimMetA e a temperatura medida a 10 metros.....	37
Figura 10 - Comparação entre a Simulação SimMetB e a temperatura medida a 10 metros.....	38
Figura 11 - Comparação entre a Simulação SimMetC e a temperatura medida a 10 metros.....	38
Figura 12 - Comparação entre a Simulação SimMetA e a velocidade medida do vento a 10 metros	40
Figura 13 - Comparação entre a Simulação SimMetB e a velocidade medida do vento a 10 metros.....	41
Figura 14 - Comparação entre a Simulação SimMetC e a velocidade medida do vento a 10 metros.....	41
Figura 15 - Comparação entre a Simulação SimMetA e a direcção real do vento a 10 metros.....	43
Figura 16 - Comparação entre a Simulação SimMetB e a direcção real do vento a 10 metros	43
Figura 17 - Comparação entre a Simulação SimMetC e a direcção real do vento a 10 metros	44

1. Introdução

O ar é um recurso essencial à vida na Terra, nomeadamente à vida humana, pois o Homem pode sobreviver vários dias sem água e algumas semanas sem alimento, no entanto apenas pode sobreviver poucos minutos sem respirar. A composição da atmosfera tem forte influência no clima e na vida do planeta.

A vida humana na Terra introduz materiais na atmosfera, através da indústria e dos transportes rodoviários havendo também episódios naturais, como por exemplo episódios vulcânicos, que são responsáveis por elevadas emissões de substâncias para a atmosfera. As fontes são por isso divididas, quanto à sua origem, em fontes antropogénicas e fontes naturais biogénicas.

A elevada quantidade de poluentes emitidos para a atmosfera, resultantes do crescente desenvolvimento urbano e industrial e da elevada utilização de veículos motorizados leva, cada vez mais, à sobrecarga dos ecossistemas, afectando negativamente a saúde humana.

A atmosfera, os oceanos e as plantas têm uma elevada capacidade de depuração dos poluentes, o que, em condições naturais, garante que os materiais introduzidos são eliminados. Os constituintes do ar são reciclados através de ciclos naturais, contudo, a elevada sobrecarga de poluentes emitidos pelo Homem, leva a um desequilíbrio deste sistema natural, o que conduz à acumulação na atmosfera de substâncias prejudiciais à vida, levando à necessidade de se tomarem medidas de prevenção ou de limpeza, que assegurem uma boa qualidade do ar.

Em Portugal, os problemas da qualidade do ar não afectam o território de uma forma sistemática, encontrando-se localizados em algumas áreas onde é maior a concentração urbana e a presença de grandes unidades industriais (e.g. Sines, Setúbal, Barreiro-Seixal, Lisboa, Estarreja e Porto). Na zona litoral existe uma elevada densidade populacional - cerca de 80% da população reside numa faixa de 50 km junto ao mar - e é onde se encontra localizada a maioria da indústria,

verificando-se, dessa forma, emissões de poluentes superiores nessa área. O facto de Portugal ter uma costa extensa, com topografia relevante, resulta no aparecimento de circulações atmosféricas complexas que têm enorme influência na produção e dispersão dos poluentes emitidos para a atmosfera (Ribeiro, 2005).

O conhecimento sobre as emissões de poluentes e a sua dispersão na atmosfera, contribui significativamente para uma actuação pro-activa, de forma a evitar fenómenos de poluição prejudiciais à população e ao planeta, nomeadamente em situações de emergência em que é essencial uma reacção rápida. O facto de se saber também qual o tipo de dispersão numa determinada área, permite prever quais os impactos de novas fontes emissoras que venham a ser implantadas.

Em Portugal, as Comissões de Coordenação e Desenvolvimento Regional (CCDR) têm a seu cargo redes de monitorização que efectuem a medição de vários poluentes (URL1) emitindo índices para informação sobre a qualidade do ar ao público em geral. No entanto, nem todas as áreas que se pretendem estudar estão dentro do alcance de estações de monitorização, sendo portanto necessário recorrer a ferramentas que permitam prever os níveis de poluentes, nomeadamente em áreas que não sejam abrangidas pela rede nacional de monitorização. A modelação da qualidade do ar é uma ferramenta eficaz de controlo e gestão da qualidade do ar. No entanto, à modelação de qualidade do ar estão associadas incertezas e erros inerentes a qualquer processo de simulação. A ocorrência de fenómenos extremos (e.g. incêndios florestais em grande escala), que normalmente não são considerados na simulação, pode levar a diferenças entre os valores estimados e os valores reais. Têm vindo a ser desenvolvidas novas abordagens que permitam uma maior fiabilidade dos modelos, através da redução da incerteza. Uma dessas abordagens é o objecto de estudo deste trabalho, o *Ensembling*, um método que visa a redução da incerteza associada às simulações, através do uso combinado de vários resultados de simulações diferentes.

Neste trabalho, recorreu-se ao modelo numérico “The Air Pollution Model” (TAPM) (Hurley *et al.*, 2005). É um modelo de fácil utilização, com capacidade para séries longas de dados, rapidez na modelação e capacidade para simular as circulações atmosféricas de mesoscala. O TAPM é um modelo de dispersão tridimensional, constituído por duas componentes, uma meteorológica e outra de poluição, que se baseia na resolução das principais equações da dinâmica de fluidos e de transporte para prever tanto a meteorologia como a concentração de poluentes. É possível avaliar e validar o desempenho do modelo, recorrendo à comparação das suas saídas (meteorológicas e de poluição) com os valores obtidos nas estações meteorológicas e de monitorização de poluentes.

O trabalho aqui apresentado está dividido em três partes fundamentais: uma primeira parte em que se revêem alguns conhecimentos básicos sobre poluição atmosférica e sobre os poluentes envolvidos neste estudo, uma segunda parte, em que se apresenta o TAPM e também o método do *Ensembling*, e, uma terceira parte, em que se apresentam os resultados das várias simulações e a sua comparação com os valores medidos nas estações de monitorização e com os valores limite da legislação nacional de qualidade do ar.

O objectivo deste trabalho é fazer uma aproximação ao método de *Ensembling*, uma ferramenta usada na modelação, baseada na análise simultânea de várias simulações através de tratamento estatístico, com o intuito de aumentar a fiabilidade desta, usando combinações dos resultados de vários modelos ou de várias simulações com um mesmo modelo. Este método pretende assim aproveitar os pontos fortes de algumas simulações para esbater os pontos fracos de outras (Galmarini *et al.*, 2004).

2. A Qualidade do Ar

O desenvolvimento galopante da sociedade, com o consequente aumento da indústria, das cidades e dos transportes, tem originado um acréscimo muito significativo da poluição atmosférica.

A poluição atmosférica pode ser definida como a introdução na atmosfera de qualquer material ou energia que possa vir a alterar as suas propriedades, podendo com isso afectar a saúde e bem-estar das várias espécies animais e vegetais que dependem ou tenham contacto com essa atmosfera, ou mesmo que venham a provocar modificações físico-químicas nas espécies minerais que tenham contacto com ela. Um exemplo conhecido é a degradação de património arquitectónico devido às “doenças da pedra” originadas pela deposição de alguns poluentes presentes no ar (Camuffo, 1992). Muitos acreditam que os poluentes se dispersam e perdem a sua periculosidade quando são enviados para atmosfera, no entanto, o que acontece é que são transportados para os mais variados sítios, provocando, por vezes, graves problemas a muitos quilómetros do ponto onde foram emitidos. A atmosfera é um dos raros recursos que é partilhado pelo mundo inteiro, pelo que os efeitos negativos sobre esta podem ser sentidos globalmente. Devido às características das circulações atmosféricas e ao tempo de residência dos poluentes na atmosfera, a poluição atmosférica apresenta um carácter transfronteiriço e é responsável por alterações ao nível planetário, o que implica que os esforços de toda a comunidade internacional se conjuguem. Há já algum tempo que se exigem acções por parte dos vários governos para ajudar a prevenir e reduzir os efeitos da degradação da qualidade do ar. No entanto, dado que já se compreendeu que as acções necessárias exigem alguns limites ao desenvolvimento industrial e social, compreende-se a razão para a reticência de alguns Estados em efectivar o compromisso assumido através do Protocolo de Quioto.

O que torna a poluição atmosférica particularmente perigosa é o facto de não ser tão simples purificar o ar antes de o usar, como fazemos, por exemplo, com a água. As fontes de poluição atmosférica são inúmeras, havendo várias formas de

prevenir essa poluição, que se agrupam em dois grandes ramos: o controlo das emissões e o controlo da qualidade do ar. Para se agir adequadamente contra a poluição atmosférica, é necessário:

- Definir as fontes poluentes;
- Reduzir as emissões de poluentes atmosféricos;
- Conhecer a concentração dos poluentes no ar;
- Avaliar a qualidade do ar;
- Definir e analisar os valores-limite de concentração dos poluentes;
- Observar a evolução de qualidade do ar;
- Planear acções que promovam melhor qualidade do ar, tais como: reordenar actividades sócio-económicas, localizar fontes e conhecer a dispersão dos poluentes, alterar percursos rodoviários e apoiar a implementação de tecnologias menos poluentes.

Para fazer a avaliação da qualidade do ar, as autoridades dos vários países membros da União Europeia estabeleceram normas e limites de concentração para vários poluentes e nomearam entidades competentes, como a Agência Europeia do Ambiente (EEA – European Environmental Agency), para a sua análise. Em Portugal, as entidades competentes são a Agência Portuguesa do Ambiente e as Comissões de Coordenação e Desenvolvimento Regional. Na Tabela 1, lista-se a legislação em vigor, comunitária e nacional e os poluentes abrangidos.

Tabela 1 – Legislação Comunitária e Nacional relativa à qualidade do ar.

Legislação Comunitária	Âmbito de Aplicação	Legislação Nacional
Directiva-Quadro Dir. nº 1996/62/CE	Sobre a avaliação e gestão da Qualidade do Ar	Decreto-Lei nº 276/99, 23 de Julho
1ª Directiva – Filha Dir. nº 1999/30/CE	Relativo ao SO ₂ , NO ₂ , NO _x , PM ₁₀ , Pb	Decreto-Lei nº 111/2002, 16 de Abril
2ª Directiva – Filha Dir. nº 2000/69/CE	Relativo ao CO, Benzeno	Decreto-Lei nº 111/2002, 16 de Abril
3ª Directiva – Filha Dir. nº 2002/3/CE	Relativo ao O ₃	Decreto-Lei nº 320/2003, 20 de Dezembro
4ª Directiva – Filha Dir. nº 2004/107/CE	Relativo ao HAP, Benzo(α)pireno, Cd, As, Ni	Decreto-Lei nº 351/2007, 23 de Outubro
Directiva nº 2008/50/CE	Relativa à Qualidade do Ar Ambiente	Ainda não foi transposta.

A Directiva-Quadro do Ar (Directiva nº 1996/62/CE de 27 de Setembro) define estratégias e objectivos para a qualidade do ar ambiente, a fim de limitar, evitar ou prevenir os efeitos nocivos sobre a saúde humana e sobre o meio ambiente. Segundo esta directiva, para avaliar a qualidade do ar são necessárias determinadas ferramentas, nomeadamente a monitorização da concentração dos poluentes atmosféricos, os inventários de emissões dos poluentes atmosféricos e a modelação da qualidade do ar, sobre a qual este trabalho se vai focar. É complementada pelas “Directivas-Filhas” que estabelecem os valores limite de concentração de diversos poluentes. Ainda este ano, foi emitida a Directiva nº 2008/50/CE de 21 de Maio de 2008, que, por razões de clareza, simplificação e eficiência administrativa, substitui os cinco actos anteriores por uma única directiva. A legislação europeia foi já transposta para o direito nacional, com excepção da Directiva nº 2008/50/CE.

Os poluentes que servem de objecto de estudo neste trabalho são: as partículas (PM₁₀), o Ozono (O₃) e os Óxidos de Azoto (NO₂ e NO_x).

Nas Tabelas 2 e 3 pode ver-se um resumo dos valores-alvo fixados na legislação nacional.

Tabela 2 - Resumo do Decreto-Lei nº 111/2002 de 16 de Abril

	Valor-Alvo	Período considerado	Valor Alvo em 2010
NO₂ e NO_X	Valor limite horário para protecção da saúde humana	Uma hora	200 µg/m ³ NO ₂ - Valor a não exceder mais de 18 vezes em cada ano civil
	Valor limite anual para protecção da saúde humana	Um ano civil	40 µg/m ³ de NO ₂
	Valor limite anual para protecção da vegetação	Um ano civil	30 µg/m ³ de NO _X
	Limiar de alerta para o NO ₂	Três horas	400 µg/m ³ medido em 3 horas consecutivas
APM	Valor limite diário para protecção da saúde humana	Vinte e quatro horas	50 µg/m ³ - Valor a não exceder mais de 7 vezes em cada ano civil
	Valor limite anual para protecção da saúde humana	Ano civil	20 µg/m ³

Tabela 3- Resumo do Decreto-Lei nº 320/2003 de 20 de Dezembro

	Valor-Alvo	Período considerado	Valor Alvo em 2010
Ozono	Limiar de informação	Uma hora	180 µg/m ³
	Limiar de alerta	Uma hora	240 µg/m ³

2.1. Matéria Particulada

A matéria particulada é um dos principais poluentes do ar que afectam a saúde das populações. As partículas têm vários tamanhos e formas, podendo ser partículas sólidas ou gotículas líquidas. Como as partículas normalmente não são esféricas, há várias definições relativas ao seu tamanho. O mais usado é o diâmetro aerodinâmico, em que se considera que uma partícula com diâmetro aerodinâmico de 10 micrómetros se move num gás como se fosse uma esfera de densidade 1g/cm³ com um diâmetro de 10 micrómetros. As partículas são divididas em dois grupos principais: as PM_{2,5}, que têm tamanho inferior a 2,5 micrómetros, designadas como fracção respirável e as PM₁₀, que tem tamanhos inferiores a 10 micrómetros, designadas como fracção torácica. Ambas são prejudiciais à saúde, tendo vindo a ser demonstrada a sua influência no aumento da mortalidade, sendo as PM_{2,5} as mais perigosas, pois devido ao seu tamanho reduzido penetram mais profundamente no aparelho respiratório humano (URL1).

No ambiente urbano as principais fontes de partículas são o tráfego automóvel, o sector industrial, as obras de construção civil e alguns processos agrícolas (URL1). As partículas emitidas para a atmosfera são depositadas através de deposição (seca e húmida) directamente nas superfícies, incluindo a vegetação. Devido às grandes áreas de superfície de que dispõem, as árvores são óptimas para a deposição de matéria particulada em suspensão na atmosfera. Também existem fontes naturais, como os vulcões, os incêndios florestais e a erosão.

As partículas, tanto naturais como antropogénicas, existem em todos os lugares, e têm influência sobre vários factores da vida na Terra: absorvem e dispersam a radiação solar, alteram a composição química da precipitação, influenciam a visibilidade e a saúde das pessoas. As partículas têm um papel importante como núcleos de condensação de nuvens, críticos para a formação e desenvolvimento destas. Sem elas, as nuvens não existiriam e a vida seria certamente diferente.

A matéria particulada é transportada pelos ventos dominantes, portanto raramente se deposita à superfície na mesma localização onde foi emitida. O tempo de residência na atmosfera depende do seu tamanho e pode ir de alguns minutos até vários dias. As partículas de tamanho superior têm um tempo de residência menor que as de tamanho inferior.

2.2. Óxidos de Azoto

NO_x é o termo genérico para um grupo de gases altamente reactivos, todos contendo azoto e oxigénio em quantidades variáveis. Muitos dos óxidos de azoto são incolores e inodoros. Contudo, um poluente comum, o dióxido de azoto (NO_2), juntamente com as partículas do ar, pode ser observado como uma camada castanho-avermelhada sobre muitas áreas urbanas.

O NO forma-se principalmente quando um combustível é queimada a altas temperaturas, em processos de combustão, combinando-se rapidamente com o

oxigénio e dando origem a NO_2 . As fontes principais são os veículos motorizados e as instalações industriais (URL1).

É um dos principais elementos envolvidos na formação do ozono troposférico, que pode provocar sérios problemas respiratórios. O NO pode formar ácido nítrico, um dos maiores componentes da chuva ácida e contribui para a sobrecarga de nutrientes que deterioram a qualidade da água.

O NO_x e os poluentes formados a partir deste podem ser transportados a longas distâncias, de acordo com os ventos dominantes. Isto significa que os problemas relacionados com o NO_x não estão confinados à área onde este é emitido. Logo, o controle do NO_x tem de ser efectuado numa perspectiva mais alargada, para além de se tentar actuar no local da emissão.

2.3. Ozono

O ozono é um composto que existe naturalmente na atmosfera, sendo produzido através da fotólise do oxigénio molecular. Absorve os raios ultravioletas, radiação essa que é extremamente nociva para a vida na Terra. Para além disso, é também um gás de estufa, devido à sua capacidade para a absorção na banda dos infravermelhos.

O ozono troposférico é um poluente segundo a World Health Organization (WHO, 2002). É um poluente secundário, ou seja, não é emitido directamente, mas formado pela incidência da luz solar sobre os hidrocarbonetos e óxidos de azoto presentes no ar, que reagem para formar ozono directamente na zona da fonte de poluição ou a vários quilómetros desta, devido à dispersão de poluentes. Actualmente, apresenta uma distribuição espacial muito superior à verificada no passado, devido ao aumento de emissões de poluentes precursores, como o metano (CH_4), o monóxido de carbono (CO), os compostos orgânicos voláteis (COV) e os óxidos de azoto (NO_x) (WHO, 2002).

O ozono reage directamente com alguns hidrocarbonetos, como aldeídos, removendo-os da atmosfera, no entanto os produtos dessa reacção são, eles mesmos, poluentes. A fotólise do ozono pela radiação UV leva à formação do radical hidróxido (OH), sendo uma reacção importante na remoção de hidrocarbonetos da atmosfera, mas cria outros produtos nocivos. O tempo de residência do ozono troposférico é de cerca de 22 dias. Os principais mecanismos de remoção são a deposição, a fotólise e reacções com o OH e o OH_2^- (Stevenson *et al*, 2006).

A elevada concentração de ozono, criada por altas concentrações dos seus precursores em conjunto com a radiação UV, prejudica e irrita o aparelho respiratório. Outros efeitos prejudiciais são a redução do tempo médio de vida de certos materiais como borracha, tintas e plásticos e também a redução na produção e qualidade das culturas agrícolas (WHO, 2002).

3. A Modelação da Qualidade do Ar

A modelação da qualidade do ar é uma simulação matemática de como os poluentes se dispersam e transformam na atmosfera. É baseada na resolução de equações matemáticas e algoritmos que simulam a dispersão e a química da atmosfera. Estes modelos são usados para estimar ou prever o transporte e transformação de poluentes emitidos a partir de fontes emissoras como indústrias ou tráfego de veículos motorizados e podem ser importantes para as entidades que têm por missão proteger e monitorizar a qualidade do ar. São normalmente utilizados para prever qual o comportamento dos poluentes emitidos por fontes existentes ou a implantar e para auxiliar na definição de estratégias de controlo para a redução de poluentes nocivos.

Os modelos de qualidade do ar requerem dados de entrada, de entre os quais se destacam:

- Condições meteorológicas como velocidade e direcção do vento, turbulência atmosférica, temperatura e alturas de inversão;
- Parâmetros das emissões como a localização e caracterização da fonte, velocidade de saída dos poluentes, concentração, caudal;
- Orografia do terreno;
- Localização e dimensões de quaisquer obstruções existentes.

Os modelos podem ser validados usando dados de medições, efectuadas em estações de monitorização. Por serem instrumentos de previsão, apresentam discrepâncias em relação ao real, visto que não têm a capacidade de prever a ocorrência de incidentes ou de episódios anormais de poluição, para além de haver modelos que conseguem prever melhor um determinado poluente ou que funcionam melhor com determinados parâmetros. Por essa razão, tem-se vindo a procurar soluções para minimizar esses erros. Apesar de tudo, a modelação de poluentes é cada vez mais um instrumento fiável e utilizado em larga escala.

3.1. O Modelo TAPM

O modelo “The Air Pollution Model” (TAPM), desenvolvido pela Australia's Commonwealth Scientific and Industrial Research Organisation (CSIRO) (Hurley *et al.*, 2005), é um modelo meteorológico de prognóstico matemático, determinístico, de mesoscala e dispersão atmosférica a três dimensões. Permite efectuar a técnica de *nesting* até um mínimo de 300 metros de resolução, o que permite focar com mais detalhe sobre a simulação, com dois módulos principais, o meteorológico e o de poluição atmosférica, permitindo visualizar uma sequência temporal de simulações horárias. É constituído por duas componentes principais (Figura 1), uma meteorológica e outra de poluição atmosférica, estimando os parâmetros meteorológicos necessários para a simulação da dispersão, tanto à escala local como regional, através da integração de ambas as componentes.

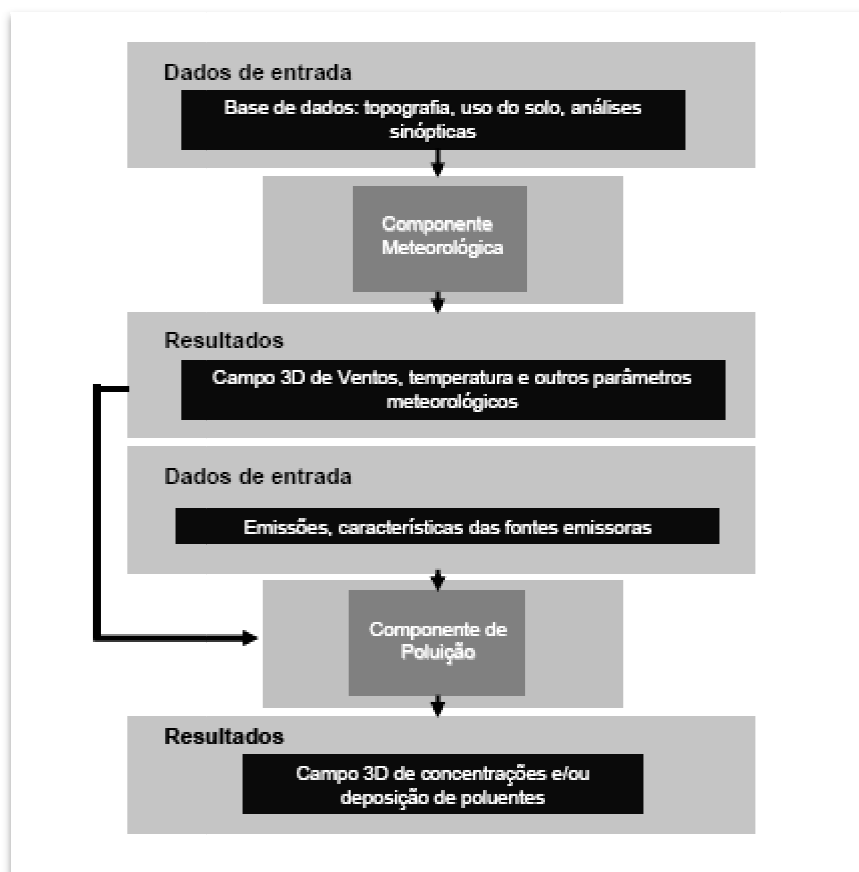


Figura 1 – Representação esquemática do Modelo TAPM (adaptação de Ribeiro, 2005)

Recorre a duas bases de dados: dados meteorológicos internacionais (sinóptica); e uma base de dados global com dados de altitude do terreno, uso do solo, temperatura do mar e análises meteorológicas sinópticas.

A base de dados de orografia, uso do solo e vegetação provém da Earth Resources Observation Systems (EROS) - sistema de coordenadas de latitude e longitude com um espaçamento de 1 km (URL2).

Os dados referentes à temperatura superficial do mar são provenientes da US National Center for Atmospheric Research (NCAR) - médias mensais de longo termo, para um espaçamento de 100 km com base nas coordenadas de latitude e longitude (URL3).

A base de dados sinóptica é obtida a partir dos modelos de previsão meteorológica Limited Area Prediction System (LAPS) (URL4) e Global Analysis and Prediction (GASP) do Bureau Of Meteorology (BOM) da Austrália - médias de 6 horas numa grelha de espaçamento de 75 a 100 km, com base em coordenadas de latitude e longitude (URL5).

Consegue simular os fenómenos meteorológicos necessários ao estudo sem ter de recorrer a dados locais. Isto inclui fenómenos tais como brisas do mar ou escoamento induzido pelo tipo de terreno. Usa um sistema de coordenadas verticais influenciado pelo terreno ("terrain following").

É um modelo desenvolvido para computador, com um interface gráfico "amigo do utilizador", o que torna o modelo de fácil utilização.

O facto de este modelo apresentar a capacidade de obter e tratar as informações meteorológicas, geográficas e de poluição, permitindo a sua observação conjunta em imagens, através da visualização da evolução temporal do campo tridimensional de concentrações de um poluente, faz dele um modelo que permite uma fácil visualização dos casos, o que pode ajudar a ilustrar determinados

problemas e a permitir uma mais fácil explicação destes. Os dados de entrada e de saída do programa são apresentados na Tabela 4.

Tabela 4 – Dados de entrada e saída do TAPM

	Dados de Entrada	Dados de Saída
Componente Meteorológica	Bases de dados de topografia, uso do solo e análises sinópticas	Campo 3D de ventos, temperatura e outros parâmetros meteorológicos
Componente Poluição Atmosférica	Emissões e características das fontes emissoras	Campo 3D de concentrações e/ou deposição de poluentes

O TAPM resolve a equação da conservação da quantidade de movimento (Equações 1 e 2) para as componentes horizontais do vento, u e v (m.s^{-1}), a equação da continuidade de um fluido incompressível (Equação 3) para a componente vertical, w (m.s^{-1}). A temperatura potencial θ (K) é determinada pelas equações da energia (Equação 4) e da conservação da água (Equação 5) (Hurley *et al.*, 2005), (Hurley, 2005b).

$$\frac{du}{dt} = -\theta \frac{\partial \pi}{\partial x} + g \left(\frac{z^* - \bar{s}}{\bar{s}} \right) \frac{\partial z_G}{\partial x} + f(v - v_g) + \left(\frac{\bar{s}}{\bar{s} - z_G} \right)^2 - \frac{\partial}{\partial z^*} \left(K_m \frac{\partial u}{\partial z^*} \right) \quad (1)$$

$$\frac{dv}{dt} = -\theta \frac{\partial \pi}{\partial y} + g \left(\frac{z^* - \bar{s}}{\bar{s}} \right) \frac{\partial z_G}{\partial y} + f(u - u_g) + \left(\frac{\bar{s}}{\bar{s} - z_G} \right)^2 - \frac{\partial}{\partial z^*} \left(K_m \frac{\partial v}{\partial z^*} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial w^*}{\partial z} = - \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{1}{\bar{s} - z_G} \left(u \frac{\partial z_G}{\partial x} + v \frac{\partial z_G}{\partial y} \right) \quad (3)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \left(\frac{\bar{s}}{\bar{s} - z_G} \right)^2 \frac{\partial}{\partial z^*} \left(K_h \frac{\partial \theta}{\partial z^*} \right) + S_\theta \quad (4)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \left(\frac{\bar{s}}{\bar{s} - z_G} \right)^2 \frac{\partial}{\partial z^*} \left(K_h \frac{\partial q}{\partial z^*} \right) + S_q \quad (5)$$

Os termos S_θ e S_q são os termos fonte/sumidouro para a temperatura potencial e humidade, respectivamente.

A componente meteorológica baseia-se na resolução da equação da continuidade de um fluido incompressível, com a opção de não-hidrostático, incluindo parametrizações dos processos físicos que contribuem para a formação de nuvens/chuva, usos do solo, turbulência e fluxos de radiação.

O fecho da turbulência utiliza uma aproximação de segunda ordem com base na Teoria dos K (coeficientes de difusividade) de $K=2,5$ e de gradientes dos termos médios. As equações dos fluxos são representadas nas Equações 6, 7 e 8.

$$\overline{u'_i u'_j} = \frac{2}{3} E \delta_{ij} - K \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (6)$$

$$\overline{u'_i \theta'} = -K \left(\frac{\partial \theta}{\partial x_j} - \gamma_\theta \right) \quad (7)$$

$$\overline{u'_i \varphi'} = -2.5K \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \quad (8)$$

Onde i, j correspondem às três direcções de coordenadas ($i=1,2,3$ para x, y, z , respectivamente), u_i, u_j são as velocidades, $\gamma_\theta = 0,00065 \text{ Km}^{-1}$ e φ é um escalar.

As condições fronteira superficiais para os termos médios são de velocidade igual a zero com $\theta_0 = C_p T_0 (1 + 0,61 q_0) / \pi_0$, com $T_0 = (1 - \sigma_f) T_g + \sigma_f T_f$ e $q_0 = (1 - \sigma_f) q_g + \sigma_f q_f$, onde σ_f é a fracção de cobertura de vegetação (g -solo e f -vegetação). A parametrização do solo e da vegetação provêm de Kowalczyk (Kowalczyk *et al.*, 1991).

O modelo pode subestimar os valores de rugosidade, fluxo de calor e fracção de cobertura urbana no centro de uma cidade, enquanto as áreas suburbanas são aproximadas a condições rurais.

Usa o comprimento de Monin-Obukhov para a determinação das condições fronteira dos fluxos turbulentos, sendo os termos de turbulência fixados nos seus valores mínimos (o modelo arranca à meia-noite). O modelo é inicializado em cada ponto da malha com os valores das componentes de velocidade do vento, temperatura potencial e humidade específica interpolados a partir da base de dados sinóptica, sendo a humidade e a temperatura superficial fixadas aos valores especificados pela parametrização do solo, ajustadas consoante a altitude.

São definidas isolinhas paralelas orientadas ao nível médio da água do mar, cortando o terreno, com a função da pressão a ser integrada a partir desse nível até ao topo do domínio, determinando-se assim a condição fronteira de topo. Na fronteira de topo do modelo, todas as variáveis são consideradas com valores iguais aos dos seus valores sinóticos. Para as equações de prognóstico são usadas condições de fronteira laterais obtidas a partir de *nesting*.

Quanto à componente de poluição atmosférica, esta usa a meteorologia e a turbulência previstas na componente meteorológica, usando a equação de prognóstico euleriana numa malha e um modelo lagrangiano opcional para a simulação de partículas numéricas.

Considera fontes antropogénicas e biogénicas pontuais, em área ou em grelha, “tracers”, partículas e poluentes reactivos (NO_x , NO_2 , O_3 e SO_2). Tem em consideração a deposição seca e húmida e tem capacidade de simular os efeitos dos edifícios próximos.

A equação de previsão das concentrações (χ) utilizada é semelhante à equação da temperatura potencial virtual e da humidade específica e inclui a advecção, a difusividade e os termos que representam as emissões do poluente (S_χ) e das reacções químicas (R_χ).

$$\frac{d\chi}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_\chi \frac{\partial \chi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_\chi \frac{\partial \chi}{\partial y} \right) - \left(\frac{\partial \sigma}{\partial z} \right) \frac{\partial}{\partial \sigma} (\overline{w' \chi'}) + S_\chi + R_\chi \quad (9)$$

A expressão para o fluxo vertical das concentrações de um poluente passivo inclui o gradiente de fluxo.

$$\overline{W'\chi'} = -K_\chi \frac{\partial \chi}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{(1-c_{x^3})}{c_{x^1}} \frac{E}{\varepsilon} \frac{g}{\theta} \overline{\theta'\chi'} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\overline{\theta'\chi'}}{dt} = & \frac{\partial}{\partial x} \left(K_\chi \frac{\partial \overline{\theta'\chi'}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_\chi \frac{\partial \overline{\theta'\chi'}}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \frac{\partial}{\partial w} \left(K_\chi \frac{\partial \overline{\theta'\chi'}}{\partial w} \right) + (K + K_\chi) \left(\left(\frac{\partial \theta}{\partial x} + \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{\partial \theta}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial \chi}{\partial x} + \frac{\partial \chi}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial \theta}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial \chi}{\partial y} + \frac{\partial \chi}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right) - \overline{W'\theta'} \frac{\partial \chi}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial z} - \overline{W'\chi'} \frac{\partial \theta}{\partial w} \frac{\partial w}{\partial z} - \\ & \frac{2}{c_x} \frac{\varepsilon}{E} \overline{\theta'\chi'} \end{aligned} \quad (11)$$

As constantes c_{x^1} , c_{x^3} e c_x têm os valores de, respectivamente, 3,0 , 0,5 e 1,6 e $K_\chi=2,5K$.

O mecanismo químico do TAPM é baseado num mecanismo semi-empírico denominado “Generic Reaction Set” (GRS), (Azzi *et al.*, 1992) com uma modificação para o peróxido de hidrogénio (Venkatran *et al.*, 1997). sendo também incluídas as reacções na fase gasosa do dióxido de enxofre e das partículas (Seinfeld e Pandis, 1998). Foram realizadas várias experiências, usando uma câmara de reacção, para prever de uma forma mais rápida a formação de ozono e o consumo de NO. O facto de este mecanismo ser baseado em dados experimentais e requerer menor tempo de computação e detalhe químico das reacções proporciona vantagens.

A validação deste mecanismo foi feita utilizando dados reais, estimativas detalhadas de outros mecanismos e incorporação em modelos de qualidade do ar além da aplicação a episódios de ozono.

Através destes estudos (Department of the Environment and Heritage, 2001) foi demonstrado que o GRS produz estimativas bastante boas para atmosferas urbanas quando comparado com outros mecanismos. Já em atmosferas rurais não apresenta previsões tão precisas. No entanto, no caso das atmosferas urbanas, possui uma limitação, pois a sua descrição dos radicais não é tão eficaz

como noutros mecanismos e nessa situação, com valores baixos de COV/NO_x o processo pode consumir rapidamente o NO_x e acelerar a formação de O₃.

As reacções químicas na atmosfera são simuladas pelo GRS considerando 10 reacções para 13 espécies: smog reactivo (R_{smog}); mistura de radicais (RP); peróxido de hidrogénio (H₂O₂), óxido de azoto (NO); dióxido de azoto (NO₂); ozono (O₃); dióxido de enxofre (SO₂); carbono orgânico não-gasoso estável (SNGOC); produtos gasosos estáveis de azoto (SGN); produtos não-gasosos estáveis de azoto (SNGN), produtos não-gasosos estáveis do enxofre (SNGS); partículas totais (APM) e partículas finas (FPM) que incluem as partículas secundárias (SNGOC), (SNGN) e (SNGS). As reacções consideradas no mecanismo encontram-se descritas na Tabela 5.

Tabela 5 – Reacções consideradas no mecanismo fotoquímico “generic reaction set” (GRS)

(Fonte: Hurley, 2005a)

$R_{smog} + h\nu \rightarrow RP + R_{smog} + \eta SNGOC$	$R_1 = k_1[R_{smog}]$
$RP + NO \rightarrow NO_2$	$R_2 = k_2[RP][NO]$
$NO_2 + h\nu \rightarrow NO + O_3$	$R_3 = k_3[NO_2]$
$NO + O_3 \rightarrow NO_2$	$R_4 = k_4[NO][O_3]$
$RP + RP \rightarrow RP + \alpha H_2O_2$	$R_5 = k_5[RP][RP]$
$RP + NO_2 \rightarrow SGN$	$R_6 = k_6[RP][NO_2]$
$RP + NO_2 \rightarrow SNGN$	$R_7 = k_7[RP][NO_2]$
$RP + SO_2 \rightarrow SNGS$	$R_8 = k_8[RP][SO_2]$
$H_2O_2 + SO_2 \rightarrow SNGS$	$R_9 = k_9[H_2O_2][SO_2]$
$O_3 + SO_2 \rightarrow SNGS$	$R_{10} = k_{10}[O_3][SO_2]$

Na Tabela 3, $h\nu$ simboliza a radiação solar, sendo h a constante de Planck e ν a frequência da radiação. Na descrição técnica do TAPM encontra-se uma descrição pormenorizada das constantes e coeficientes de cada reacção (Hurley, 2005a).

A possibilidade de calcular a sobre-elevação da pluma, de recorrer ao modelo lagrangiano de partículas, e de usar uma grelha euleriana para a descrição dos edifícios, permite a modelação, com precisão, de plumas industriais com boa resolução, mesmo em simulações longas. Do mesmo modo, o uso de um

mecanismo químico condensado, permite a modelação de ozono, óxidos de azoto e partículas para longos períodos de tempo.

O TAPM é um modelo simples de usar, também porque apresenta algumas simplificações, nomeadamente, o facto de a dispersão intercontinental de poluentes não ser considerada, dado que a sua aplicação se limita a poucos milhares de quilómetros; a não consideração da estratosfera, devido à altitude máxima ser de 8 km; a simplificação dos processos de precipitação; os processos de deposição húmida e seca; um mecanismo simplificado para o “smog” fotoquímico, apenas aplicável a poluição urbana e regional.

Apesar de ser um modelo com bastante capacidade, apresenta algumas limitações como o seu domínio horizontal ser limitado a uma grelha 1500 km x 1500 km, devido ao facto de assumir uma grelha uniforme, desprezando a curvatura da Terra. Não pode ser usado para circulações atmosféricas de elevada altitude ou para condições meteorológicas extremas e não considera parametrizações de larga escala das nuvens, utilizando parametrizações típicas para grelhas de 3 km ou inferiores, não tendo em conta processos de gelo ou neve. O mecanismo químico GRS usado é pouco sensível a pequenas alterações nos inventários de emissões de Compostos Orgânicos Voláteis (COV), sendo portanto necessário escolher com cuidado o mecanismo químico que se vai usar, dependendo da região a que se vai aplicar o modelo.

O modelo TAPM permite fazer alterações nos parâmetros de entrada, tanto na componente meteorológica como na componente de poluição atmosférica. Esta é uma característica útil do modelo, que será utilizada para fazer o *Ensembling*, pois usando o mesmo modelo, é possível alterar diferentes parâmetros de entrada, o que permite testar se, usando diferentes parametrizações, se vão obter resultados diferentes. No entanto, o *Ensembling* é muito mais do que apenas testar diferentes parametrizações, como se vai ver no capítulo seguinte.

3.2. O *Ensembling*

A modelação é uma ferramenta eficaz, largamente usada no controle e gestão da qualidade do ar. No entanto, como já foi referido, dado que a modelação é uma previsão, acarreta vários erros, como por exemplo o facto de não estar preparada para simular situações acidentais e inesperadas, que têm grande influência sobre a emissão dos poluentes. Apesar da utilidade e do bom desempenho dos modelos de Qualidade do Ar, existem incertezas que lhes são inerentes, relacionadas não só com a própria dificuldade em simular a realidade, mas também com os dados de entrada. Para tentar criar uma maior fiabilidade na modelação da Qualidade do Ar, têm vindo a ser desenvolvidas novas abordagens que permitam conferir-lhe uma robustez superior. Uma destas abordagens é conhecida como *Ensembling*.

A incerteza na modelação dificilmente pode ser gerida usando apenas um modelo e/ou uma simulação. Cada modelo (ou simulação) tem determinados aspectos onde é melhor ou pior, podendo ocorrer desvios devido a: diferentes previsões da meteorologia utilizadas, diferentes pressupostos do modelo, diferentes "set-ups" do modelo, diferente processamento da informação meteorológica, ou, diferentes utilizadores. No entanto, combinando as diferentes simulações num *ensemble*, é possível reduzir as falhas individuais (Mason, 2004). Um *ensemble* pode dar melhorias significativas se os modelos participantes tiverem pontos fortes e fracos que se complementem.

Existem vantagens em se usar um *ensemble* de modelos em vez de apenas um modelo para a apreciação da qualidade do ar. O *ensemble* normalmente apresenta resultados mais próximos das medições do que um modelo isolado (Delle Monache e Stull, 2003; McKeen *et al.*, 2005).

Para efectuar a simulação das concentrações de um poluente, os modelos usam não apenas equações físicas, mas também um certo número de parametrizações, onde os parâmetros foram determinados a partir de conjuntos reduzidos de

observações ou empiricamente. A incerteza de todos estes valores traduz-se numa incerteza global na concentração simulada do poluente (Van Loon *et al*, 2006).

Existe uma grande variedade de opções passíveis de alteração quando se constrói um modelo: as resoluções vertical e horizontal, o mecanismo químico, o método de resolução, a descrição e a física do aerossol assim como outros processos físico-químicos.

Apesar de todas estas opções serem geralmente baseadas em processos, métodos e parametrizações individuais validados e publicados, a sua integração num modelo químico de transporte leva a possível acumulação ou compensação de erros. Estes problemas podem comprometer a simulação da qualidade do ar, assim como a avaliação numérica do impacto das mudanças nas emissões na qualidade do ar.

Um aumento da resolução espacial aumenta não só a variabilidade das concentrações, mas também a amplitude dos erros devidos à meteorologia, resolução vertical, uso do terreno e outros factores. No entanto, uma resolução superior permite ter em conta grandes concentrações de poluentes perto da fonte (Vautard *et al*, 2007).

O método de Ensembling, originalmente desenvolvido para previsões meteorológicas, tem sido ultimamente usado para aplicações relativas a modelos de dispersão de poluição atmosférica (Galmarini *et al.*, 2004).

Conhecido como EDM (*Ensemble Dispersion Modeling*), é um método que, através de análise e tratamento estatístico de várias simulações relativas a um mesmo caso comum, procura ajudar a compreender a dependência dos padrões de dispersão de poluentes em relação a alguns pontos:

- os escoamentos atmosféricos usados no cálculo da dispersão;
- as aproximações usadas para a modelação;

- as características das fontes;
- o nível de concordância entre as aproximações de diferentes modelos (escoamento e dispersão).

Este método procura prever os padrões de dispersão de poluentes mais prováveis, eliminando a incerteza inerente a qualquer previsão.

Um dos pontos fortes do *Ensembling* reside no facto de que mais informação pode ajudar a promover resultados mais detalhados e mais coincidentes com o real. Fazendo a aproximação com o conceito de média é possível compreender como funciona o *Ensembling*, apesar de este ser superior a uma simples média.

Em geral, quando se usa o *ensemble*, as diferentes simulações de dispersão de poluentes atmosféricos que o constituem, chamadas membros do *ensemble*, podem ser obtidas através de diferentes técnicas:

- a) *Apenas um modelo meteorológico e um de poluição, alterando as condições meteorológicas iniciais*: para um único caso de estudo dado, são calculadas várias simulações meteorológicas usando o mesmo modelo, alterando condições iniciais sensíveis. Essas várias corridas podem também ser objecto de um *ensemble* (Straume *et al.*, 2001). De seguida, o modelo de poluição atmosférica é usado, sendo alimentado pelas várias simulações meteorológicas. Conforme já demonstrado, o *ensemble* criado deste modo, atesta a dependência da modelação em relação à variabilidade atmosférica (Galmarini *et al.*, 2004).
- b) *Apenas um modelo meteorológico e um de poluição, alterando as condições iniciais de poluição*: usando uma simulação calculada através de um modelo meteorológico, alteram-se várias condições de entrada de um modelo de dispersão atmosférica, de modo a obterem-se diversas simulações diferentes. A escolha dos diferentes parâmetros iniciais pode ser feita através de definições ad-hoc ou técnicas de Monte-Carlo (Burmaster e Anderson, 2003), que produzem aleatoriamente diferentes conjuntos de simulações iniciais, seleccionados a partir de uma

distribuição predefinida de parâmetros. Este tipo de *ensemble* mostra a dependência da modelação da poluição atmosférica em relação à variação de condições de emissão dos poluentes.

- c) *Vários modelos meteorológicos e apenas um modelo de poluição atmosférica*: vários modelos geram vários campos meteorológicos de um mesmo caso de estudo. De seguida, um único modelo de dispersão de poluição, cria um *ensemble* usando todas as simulações meteorológicas. Esta aproximação é similar à exposta na alínea a), mas inclui o impacto que o tipo de aproximação usada para o cálculo do campo meteorológico em diferentes modelos tem sobre a simulação de poluição atmosférica.
- d) *Um único modelo meteorológico e vários modelos de poluição atmosférica*: várias simulações de dispersão de poluentes são calculadas a partir de uma única simulação de condições meteorológicas. Esta aproximação mostra o impacto dos diferentes modos de cálculo da dispersão atmosférica sobre a modelação.
- e) *Vários modelos meteorológicos e vários modelos de poluição atmosférica*: usando diferentes modelos meteorológicos, calculam-se várias simulações meteorológicas que, ao serem usadas para alimentar diferentes modelos de poluição atmosférica, conceptualmente diferentes entre si, permitem a criação de várias simulações de dispersão de poluentes de um mesmo caso de estudo. Os resultados dados por cada um dos modelos de poluição constituem os membros do *ensemble*. Este é um caso relativamente geral, quando comparado com as técnicas anteriores, visto que a variedade de casos produzidos é dependente das aproximações usadas, tanto na modelação meteorológica como na de dispersão de poluição (Galmarini *et al*, 2001). O uso de simulações provenientes de diferentes modelos meteorológicos baseados em diferentes condições iniciais é particularmente útil quando não existem medições efectuadas disponíveis para a validação e afinação do modelo. O *ensemble* em que se usam vários modelos meteorológicos e de dispersão permite a análise de uma grande variedade de dados

resultantes de muitas simulações e aproximações diversas (Delle Monache e Stull, 2003).

Uma representação esquemática das diferentes técnicas da *ensembling* pode ser observada na Figura 2:

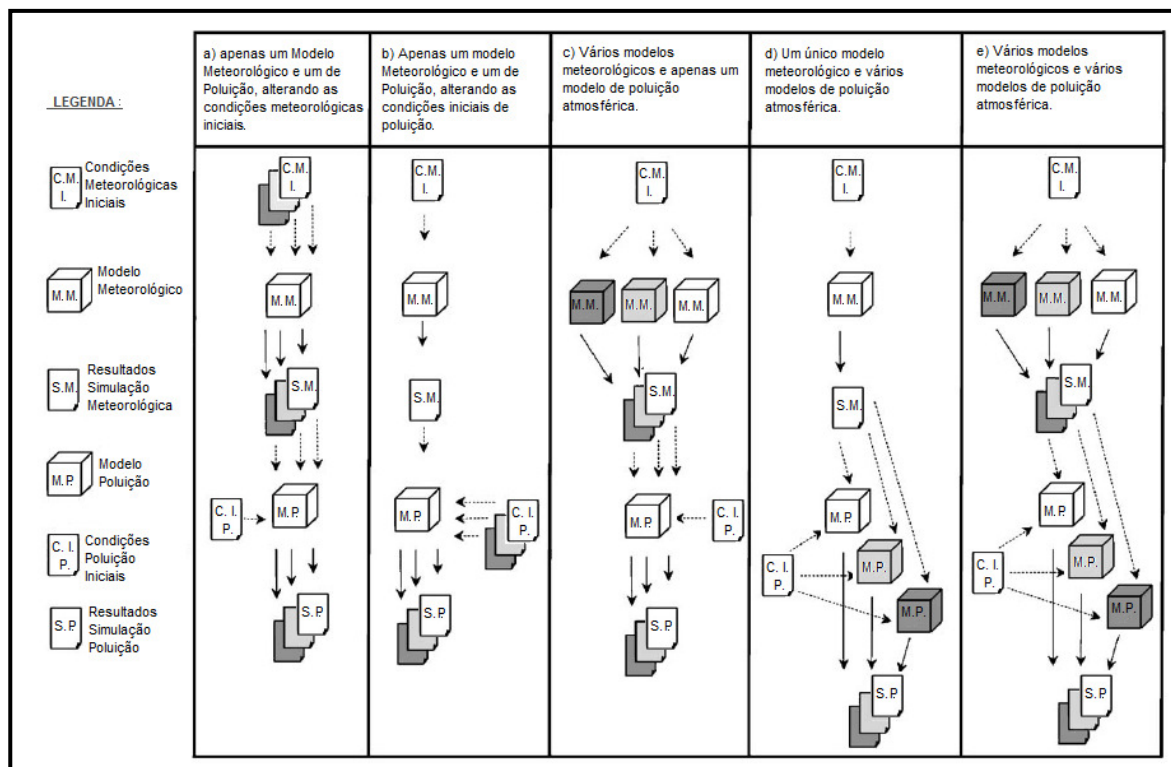


Figura 2 – Representação esquemática de 5 tipos de *Ensembling* (adaptação de Galmarini *et al*, 2004)

Após o *ensemble* das simulações de poluição ter sido obtido usando uma das técnicas descritas atrás, a sua análise pode ser feita recorrendo a parâmetros estatísticos. Esta análise é um método eficiente para se obterem resultados probabilísticos que são úteis para estimar a sensibilidade da modelação a determinadas condições iniciais sensíveis como algoritmos utilizados pelo modelo, condições fronteira, física do modelo, orografia utilizada, condições das emissões e das fontes emissoras. Os resultados de um *ensemble* contêm mais informação do que os resultados dados por um único modelo pois não resultam de uma única configuração, mas de várias configurações diferentes. Este aspecto torna-se mais evidente quando não existem dados de monitorização que permitam a comparação e validação dos resultados dos modelos e quando estes

são usados para suportar tomadas de decisão, pois permite incluir num estudo várias variáveis que podem influenciar a dispersão de um dado poluente (Galmarini *et al*, 2004).

O desempenho das simulações individuais e do *Ensemble* pode ser examinada usando parâmetros estatísticos, como por exemplo, o coeficiente de correlação, índices de concordância ou erros.

Neste trabalho vai-se usar apenas um modelo, o TAPM, dado que, por possuir as duas componentes, meteorológica e de poluição, permite variar alguns parâmetros iniciais em ambas, efectuando-se no final uma aproximação ao *Ensembling*, através da média dos resultados das várias simulações efectuadas com o modelo e comparando-se os resultados das diferentes simulações e do *ensemble* com as observações feitas nas estações de monitorização. Neste caso vai-se usar um *ensemble* do tipo descrito na alínea b), usando apenas um modelo meteorológico e um de poluição, alterando as condições iniciais de poluição. As condições meteorológicas iniciais vão ser alteradas apenas a princípio no sentido de se escolher a simulação meteorológica que mais se aproxima dos dados medidos, fazendo a sua validação com os dados obtidos na Estação Meteorológica da Universidade de Aveiro.

4. Caso de Estudo

Para a simulação do desempenho do TAPM, recorrendo à técnica de “*nesting*”, seleccionou-se um caso de estudo relativamente bem caracterizado no que se refere aos dados de entrada necessários e às medições a usar para a validação. Para além da disponibilidade de informação, pretendia-se uma área afectada por circulações de mesoscala e de topografia não muito complexa. A região de Aveiro reúne as várias condições referidas.

4.1. Condições de Simulação

4.1.1. Domínio de Simulação

O modelo matemático TAPM foi aplicado recorrendo à técnica de “*nesting*” a quatro domínios de simulação. Os domínios de simulação foram seleccionados fazendo coincidir os seus pontos centrais com o centro da cidade de Aveiro, mais especificamente com a localização da Estação de Qualidade do Ar de Aveiro (estação urbana de tráfego), na Escola Secundária José Estevão.

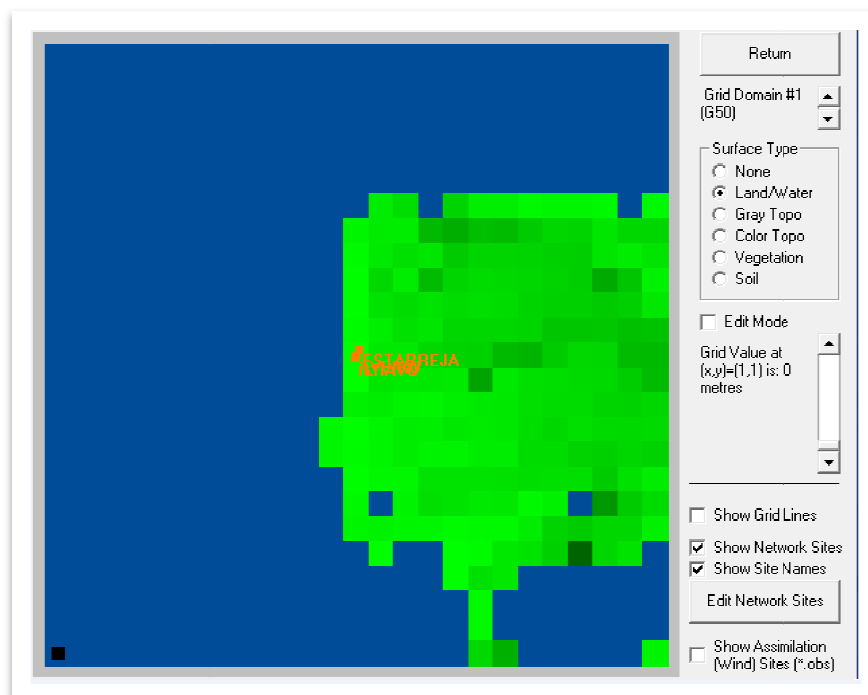


Figura 3 – Domínio de Simulação 1200 km x 1200 km

Este domínio engloba a quase totalidade da Península Ibérica, para além de uma grande área do Oceano Atlântico, o que permite que a influência que este tem na dispersão de poluentes seja tomada em linha de conta.

O modelo foi então aplicado, recorrendo à técnica de “*nesting*”, aos seguintes domínios de simulação:

- Domínio 1 – 24 x 24 células com 50 km de resolução horizontal, com dimensão total de 1200 x 1200km² (Figura 3);
- Domínio 2 – 24 x 24 células com 30 km de resolução horizontal, com dimensão total de 720 x 720km² (Figura 4);
- Domínio 3 – 24 x 24 células com 8 km de resolução horizontal, com dimensão total de 192 x 192km² (Figura 5);
- Domínio 4 – 24 x 24 células com 2 km de resolução horizontal, com dimensão total de 48 x 48km² (Figura 6).

As dimensões dos domínios seguintes foram escolhidas de modo a tentar manter uma relação entre os tamanhos das células de cálculo, de um domínio para o outro, na gama 2-4 (Hurley, 2005b).

Na vertical considerou-se um domínio de 8000 metros, divididos por vinte e cinco níveis com espaçamento desigual, sendo mais apertado junto do solo, com uma altura de 10 metros.

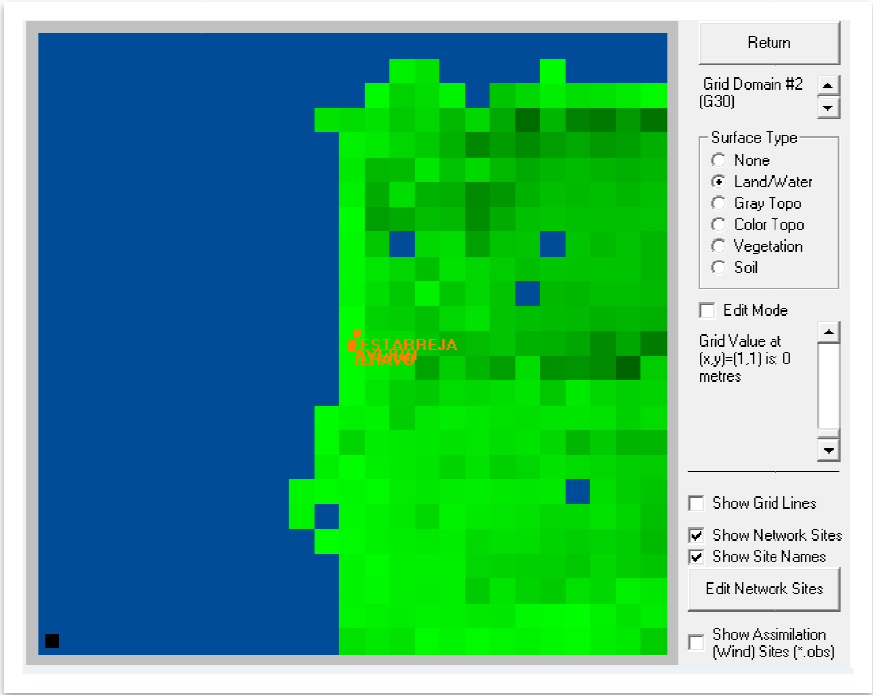


Figura 4 – Domínio de Simulação 720 km x 720 km

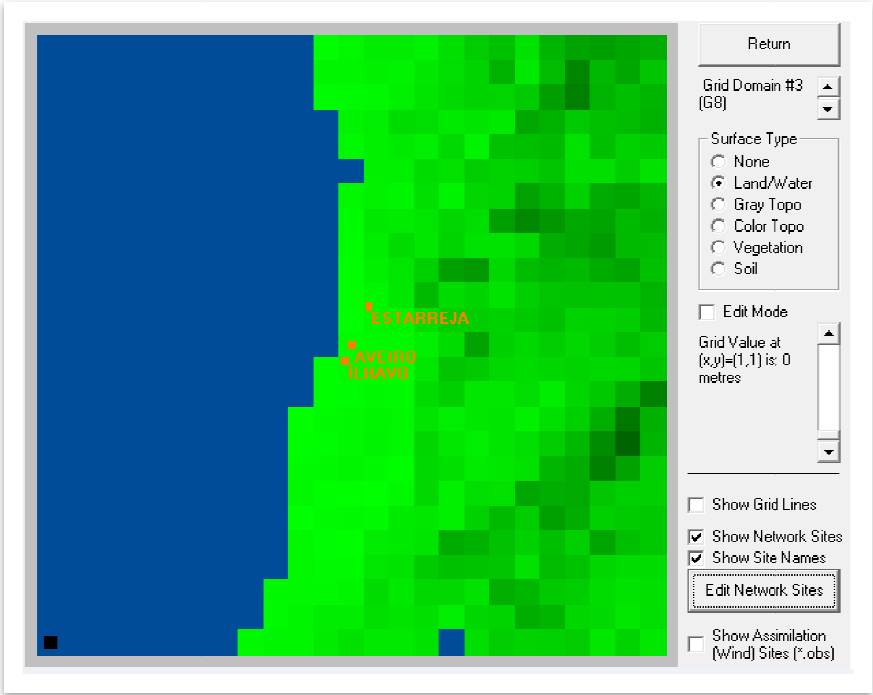


Figura 5 – Domínio de Simulação 192 km x 192 km

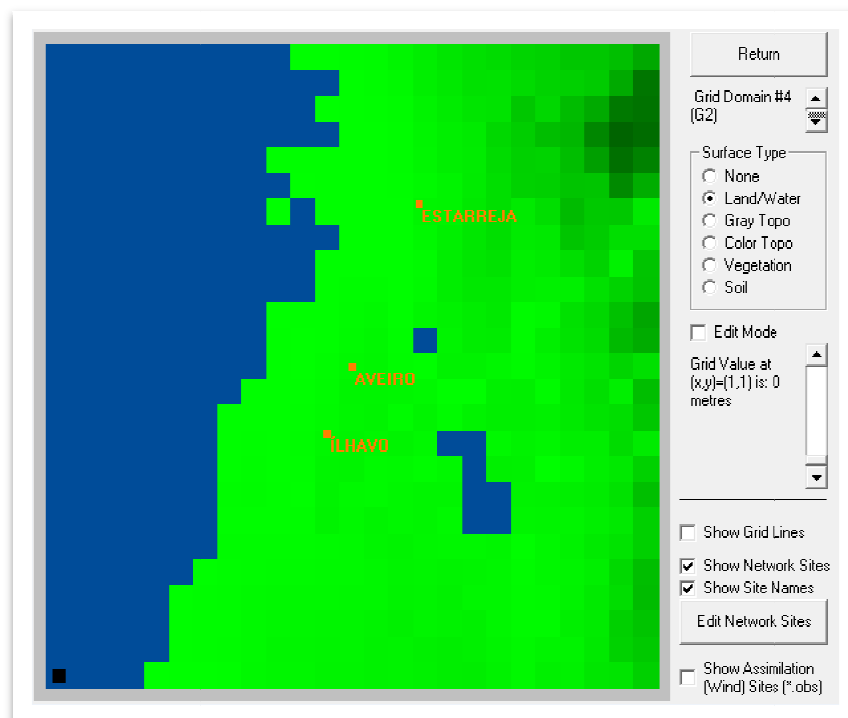


Figura 6 – Domínio de Simulação 48 km x 48 km

Todos os domínios incluem as três estações de monitorização de Qualidade do Ar, assinaladas nas figuras 3, 4, 5, 6 e 7:

- Estação de Qualidade do Ar de Aveiro, urbana de tráfego, localizada na Escola Secundária José Estevão;
- Estação de Qualidade do Ar de Ílhavo, suburbana de fundo, localizada na Escola Básica 2+3 Gabriel de Ançã;
- Estação de Qualidade do Ar de Estarreja/Teixugueira, suburbana industrial, localizada em Beduído/Teixugueira.

4.1.2. Emissões

Os dados de emissões usados no ficheiro foram obtidos através dos dados do Inventário Nacional de Emissões Atmosféricas (INERPA) realizado anualmente em Portugal pela Agência Portuguesa do Ambiente (APA). Este inventário é realizado para gases acidificantes, eutrofizantes, precursores de ozono, partículas e metais pesados, de acordo com a metodologia CORINAIR, adoptada como

referência. Neste âmbito, Portugal prepara, para cada ano, a espacialização do inventário no âmbito da Convenção sobre Poluição Atmosférica Transfronteiriça a Longa Distância (CLTRAP).

Os dados de emissões foram fornecidos ao modelo na forma de um ficheiro de emissões em grelha (ficheiro *.gse). Este ficheiro foi feito de modo a que o centro fosse também a Estação de Qualidade do Ar de Aveiro, conforme se pode observar na figura 7, onde se vê o domínio 4 e a amarelo a grelha criada pelo ficheiro de emissões. Este ficheiro fornece ao modelo as emissões dos diferentes poluentes estudados neste trabalho (PM_{10} , NO_x , NO_2) em cada ponto da grelha. As emissões de Ozono são calculadas pelo modelo, não fazendo parte dos dados de entrada fornecidos ao programa.

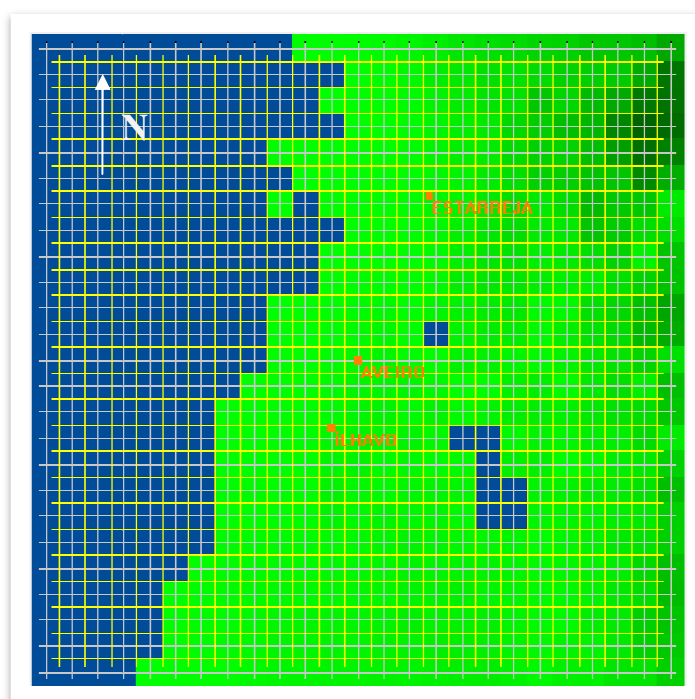


Figura 7 – Grelha de emissões usada para as Simulações

Relativamente às concentrações de fundo que foram usadas no modelo para uma das simulações de Qualidade do Ar, estas foram calculadas fazendo a média dos valores observados na estação de Qualidade do Ar de Ílhavo (estação suburbana de fundo), durante o ano de 2005.

Consideraram-se as seguintes concentrações de poluentes:

- PM_{10} : $27,7 \mu\text{g}/\text{m}^3$;
- O_3 : $51,9 \mu\text{g}/\text{m}^3 = 26,45\text{ppb}$;
- NO_2 : $15,7 \mu\text{g}/\text{m}^3 = 8,35\text{ppb}$.

4.1.3. Aplicação do TAPM

Na realização deste trabalho foram efectuadas várias simulações da meteorologia para o mês de Março de 2005, usando a componente meteorológica do TAPM, alterando alguns parâmetros iniciais. Compararam-se então os resultados obtidos com os valores medidos na Estação Meteorológica da Universidade de Aveiro, de modo a determinar qual a melhor parametrização inicial, tendo-se de seguida simulado todo o ano de 2005 com essa parametrização.

A simulação meteorológica assim obtida foi usada no cálculo de várias simulações de dispersão de poluentes, para o ano completo de 2005, alterando diversas condições iniciais, obtendo-se várias séries de resultados que foram combinados num *ensemble*, através da média dos valores. De seguida foi efectuada a comparação dos resultados obtidos e do *ensemble* com os valores medidos nas três Estações de Monitorização de Qualidade do Ar, para determinar qual o conjunto de resultados que mais se aproximava dos valores medidos.

Na Figura 8 pode observar-se o fluxograma da metodologia seguida neste trabalho.

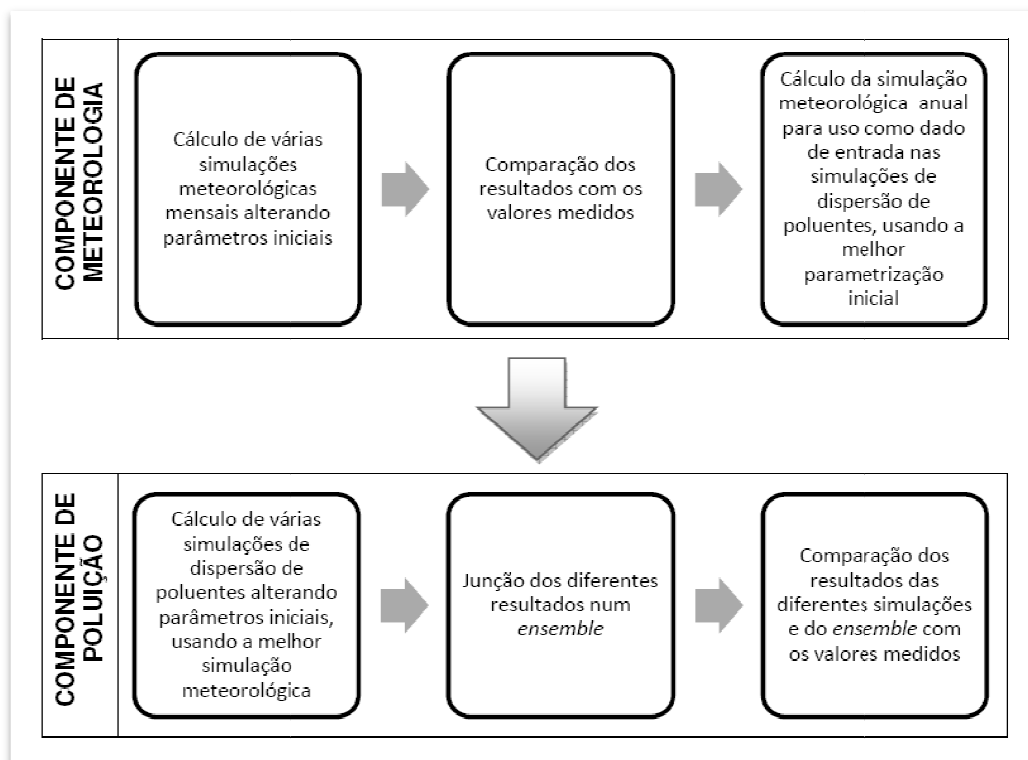


Figura 8 – Fluxograma da metodologia usada

4.2. Componente de Meteorologia

Foram feitas várias simulações da componente de meteorologia no sentido de identificar a melhor, através da comparação com os dados recolhidos na Estação Meteorológica da Universidade de Aveiro, para utilização posterior na simulação de Qualidade do Ar.

Para tal foram usados alguns parâmetros estatísticos, descritos em Hirdman (2006) e já utilizados em estudos realizados com o TAPM (Luhar e Hurley, 2004). Borrego *et al.* (2008) e a Environmental Protection Agency (EPA, 1991) também aconselham alguns desses parâmetros.

Os parâmetros estatísticos utilizados para avaliar as simulações meteorológicas foram os seguintes:

- IOA – Index of Agreement (Índice de Concordância);

- RMSE – Root Mean Square Error (Erro Quadrático Médio Sistemático);
- $SKILL_R$ – Índice de Capacidade/Habilidade;
- r – Coeficiente de Correlação de Pearson.

As equações dos referidos parâmetros são as seguintes:

$$IOA = 1 - \left[\frac{\sum_{i=1}^N (P_i - O_i)^2}{\sum_{i=1}^N (|P_i - O_{\text{médio}}| + |O_i - O_{\text{médio}}|)^2} \right] \quad (12)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (P_i - O_i)^2} \quad (13)$$

$$SKILL_R = \frac{RMSE}{O_{\text{médio}}} \quad (14)$$

$$r = \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})(P_i - \bar{P})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^N (P_i - \bar{P})^2}} \quad (15)$$

Onde:

O_i – valores medidos;

$O_{\text{médio}}$ – média dos valores medidos;

P_i – valores estimados;

$P_{\text{médio}}$ – média dos valores estimados;

N – número de valores.

O Índice de Concordância pretende avaliar a variação das estimativas feitas pelo modelo em relação às medições. Se o seu valor for superior a 0,5 considera-se que o comportamento do modelo é bom, sendo que um valor de 1,0 seria considerado um ajuste perfeito.

O RMSE fornece uma boa medida do desempenho do modelo. É frequentemente usado para medir as diferenças entre valores dados por um modelo e os valores medidos, sendo uma medida da exactidão de um modelo. Pode assumir valores de zero a infinito, sendo que os valores mais baixos indicam melhor desempenho.

O Índice de Capacidade/Habilidade evidencia o bom comportamento do modelo, ou seja, se este produz estimativas próximas dos valores obtidos nas estações de monitorização. Pode assumir valores entre 0 e 1, sendo os melhores valores os mais próximos de 0.

O Coeficiente de Correlação de Pearson mede o grau da correlação e o sentido dessa correlação - se positiva ou negativa - entre duas variáveis. Este parâmetro assume valores entre -1 (correlação negativa perfeita) e 1 (correlação positiva perfeita).

Na Tabela 6 são apresentados os valores possíveis de cada parâmetro e também os valores óptimos que cada um desses parâmetros pode assumir.

Tabela 6 – Gama de valores possíveis e valores óptimos dos parâmetros estatísticos (Hirdman, 2006)

Parâmetro	Gama de valores possíveis	Valores óptimos
IOA	[0 ; 1]	1 (valores superiores a 0,5 são considerados bons)
RMSE	[0 ; ∞]	0 (valores mais baixos são melhores)
SKILL_R	[0 ; 1]	Valores mais próximos de 0
r	[-1 ; 1]	1 (correlação positiva perfeita); -1 (correlação negativa perfeita)

Com o objectivo de avaliar a componente de meteorologia do TAPM iniciou-se a análise para um mês (Março de 2005) de simulações horárias, alterando alguns

parâmetros iniciais. A comparação foi feita para as variáveis Temperatura do Ar, Velocidade e Direcção do Vento a 10 metros de altura. Foram efectuadas três simulações:

- SimMetA, onde se usaram todos os valores por defeito do TAPM;
- SimMetB, com todos os parâmetros iniciais da SimMetA, excluindo a opção hidrostática, que foi alterada para não-hidrostática;
- SimMetC, com todos os valores iguais aos da SimMetA mas, em vez de as condições sinópticas variarem no espaço tridimensional e no tempo, variam apenas em altura e no tempo.

As principais características das diferentes simulações podem ser observadas na Tabela 7.

Tabela 7 - Simulações de Meteorologia e definições iniciais utilizadas

Simulação	Definições iniciais utilizadas
SimMetA	Simulação efectuada com os valores por defeito do TAPM
SimMetB	Simulação efectuada com a Opção não-hidrostático
SimMetC	Simulação efectuada com Ventos Sinópticos, Temperatura e Humidade a variar com a altura e o tempo.

4.2.1. Comparação de Temperaturas

Os valores estimados pelo TAPM, para o domínio mais pequeno (Domínio 4) são relativos à altura de 10 metros, sendo os valores de média horária. A Estação Meteorológica da Universidade de Aveiro (EMUA) fornece valores instantâneos e médias horárias às alturas de 2, 10, 20 e 30 metros, sendo que:

- TA02 – Temperatura instantânea (°C) medida a 2 metros de altura;
- TA02_AVG – Temperatura (°C) média horária medida a 2 metros de altura;
- TA10 – Temperatura instantânea (°C) medida a 10 metros de altura;
- TA10_AVG – Temperatura (°C) média horária medida a 10 metros de altura;

- TA20 – Temperatura instantânea (°C) medida a 20 metros de altura;
- TA20_AVG – Temperatura (°C) média horária medida a 20 metros de altura;
- TA30 – Temperatura instantânea (°C) medida a 30 metros de altura;
- TA30_AVG – Temperatura (°C) média horária medida a 30 metros de altura.

Dado que os resultados do TAPM são relativos a 10 metros de altura, as comparações apresentadas de seguida são feitas com os valores medidos a 10 metros de altura (no entanto, apresenta-se no Anexo A um resumo das comparações efectuadas para todas as alturas). Fez-se a comparação com as médias e os valores instantâneos para compreender se haveria disparidades muito grandes entre eles. O resumo das comparações é apresentado nas Tabelas 8, 9, 10 e 11.

Tabela 8 – IOA entre os resultados das simulações e os valores medidos de temperatura

	TA10	TA10_AVG
SimMetA	0,93	0,93
SimMetB	0,84	0,84
SimMetC	0,93	0,93

Tabela 9 – RMSE entre os resultados das simulações mensais e os valores medidos de temperatura

	TA10	TA10_AVG
SimMetA	2,14	2,16
SimMetB	2,84	2,83
SimMetC	2,20	2,22

Tabela 10 – SKILL_R entre os resultados das simulações mensais e os valores medidos de temperatura

	TA10	TA10_AVG
SimMetA	0,17	0,17
SimMetB	0,22	0,22
SimMetC	0,17	0,17

Tabela 11 - Correlação entre os resultados das simulações mensais e os valores medidos de temperatura

	TA10	TA10_AVG
SimMetA	0,89	0,89
SimMetB	0,88	0,88
SimMetC	0,89	0,88

Os melhores valores (indicados a cor verde) pertencem sempre à simulação SimMetA, quando se comparam os valores calculados pelo modelo com os

valores medidos de temperatura. Também se observa que não existe grande diferença quando se comparam os valores instantâneos e médios. No caso do IOA, a SimMetA é a que apresenta o valor mais elevado, indicando uma concordância alta (0,93), enquanto para o RMSE é a que apresenta o valor mais baixo (2,14). Em ambos os casos, o valor corresponde à temperatura instantânea medida a 10 metros de altura. Também no caso do $SKILL_R$ e da Correlação, a simulação SimMetA é a que apresenta os melhores valores.

Nas Figuras 9, 10 e 11 são apresentadas as comparações, entre os valores de Temperatura calculados e medidos ao longo do mês, para cada uma das simulações (SimMetA, SimMetB e SimMetC).

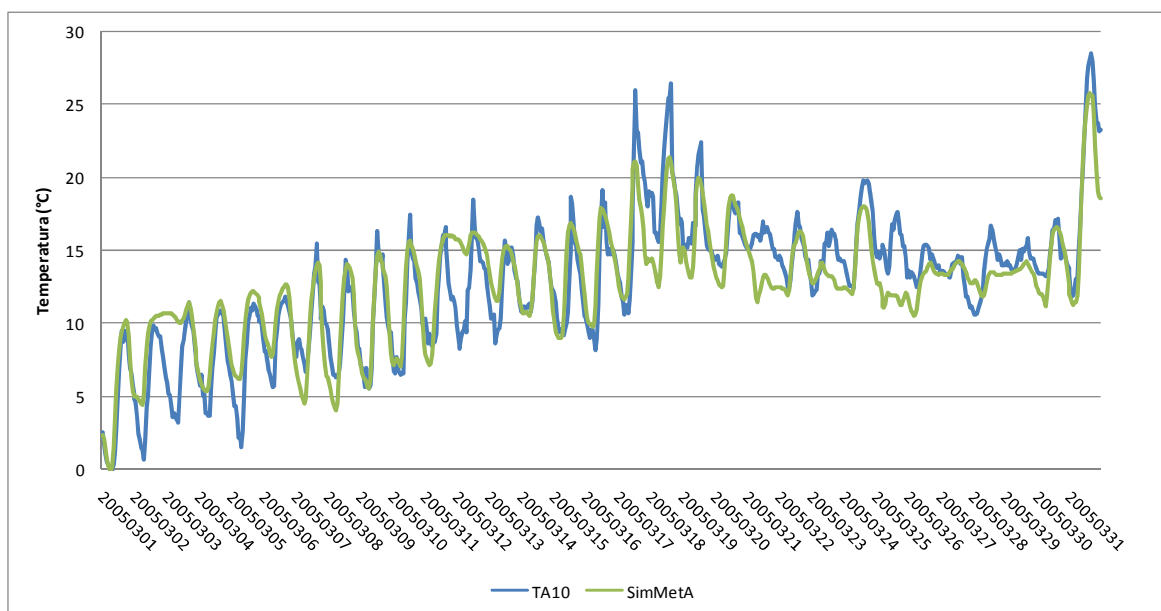


Figura 9 – Comparação entre a Simulação SimMetA e a temperatura medida a 10 metros

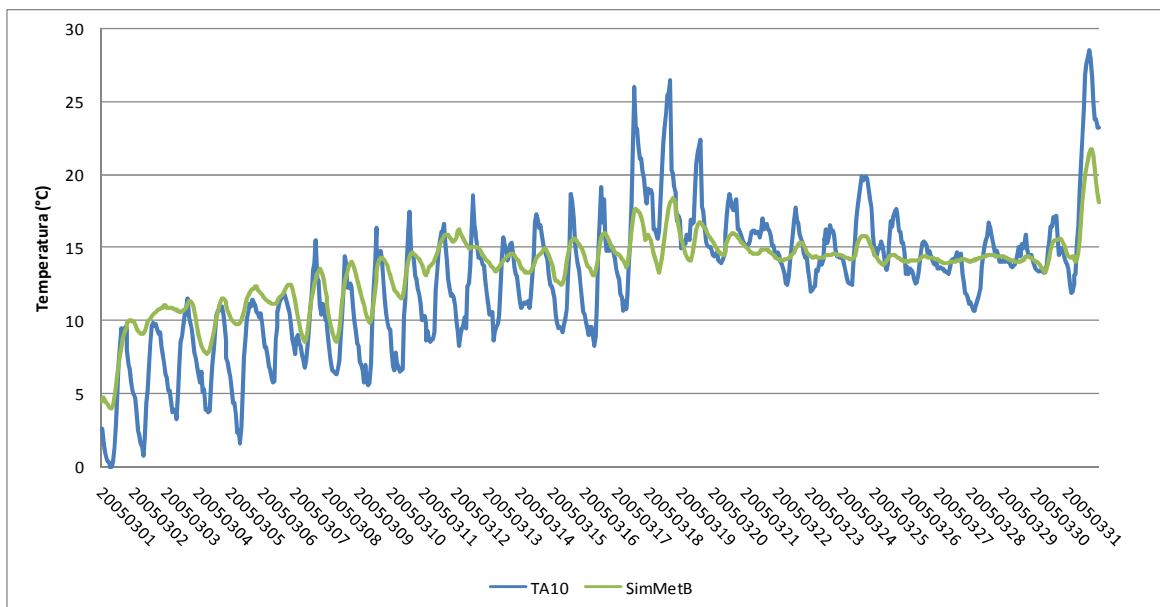


Figura 10 - Comparação entre a Simulação SimMetB e a temperatura medida a 10 metros

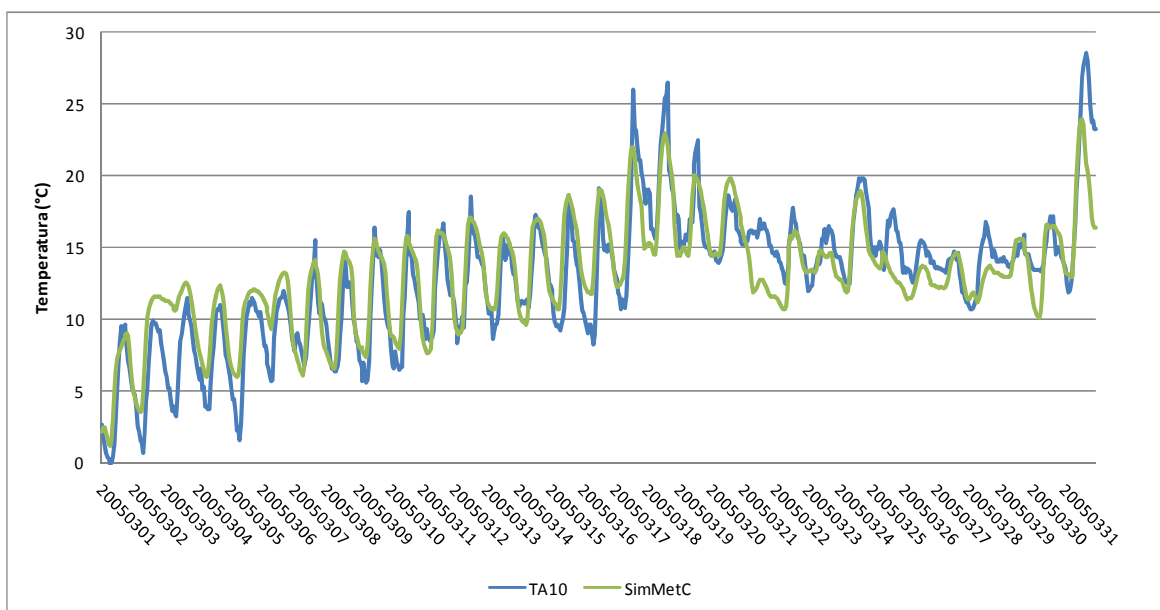


Figura 11 - Comparação entre a Simulação SimMetC e a temperatura medida a 10 metros

A partir da observação dos gráficos das Figuras 7, 8 e 9, pode ver-se que todas as simulações têm um comportamento semelhante ao seguido pela temperatura medida. No entanto, as Simulações SimMetA e SimMetC são as que melhor se ajustam aos valores medidos. A SimMetB, apesar de seguir a tendência dos valores medidos, não consegue acompanhar as variações e os picos, o que poderá indicar que, numa área como a de Aveiro não se justifica, nem é aconselhável, o modo não-hidrostático.

4.2.2. Comparação de Ventos

- **Velocidade do Vento**

A Estação Meteorológica da Universidade de Aveiro fornece valores de velocidade do vento máxima e média horária às alturas de 10, 20 e 30 metros:

- VV10_AVG – Velocidade média horária do vento a 10 metros (m.s^{-1});
- VV10_MAX – Velocidade máxima do vento a 10 metros (m.s^{-1});
- VV20_AVG – Velocidade média horária do vento a 20 metros (m.s^{-1});
- VV20_MAX – Velocidade máxima do vento a 20 metros (m.s^{-1});
- VV30_AVG – Velocidade média horária do vento a 30 metros (m.s^{-1});
- VV30_MAX – Velocidade máxima do vento a 30 metros (m.s^{-1}).

Uma vez mais, e dado que os resultados do TAPM são relativos a 10 metros, as comparações foram efectuadas com os valores medidos a essa altura, sendo apresentado no Anexo B um resumo das comparações efectuadas para todas as alturas. Os valores dos indicadores estatísticos de qualidade são apresentados nas Tabelas 12, 13, 14 e 15.

Tabela 12 – IOA entre os resultados das simulações e os valores medidos de velocidade do vento

	VV10_AVG	VV10_MAX
SimMetA	0,63	0,73
SimMetB	0,55	0,69
SimMetC	0,51	0,63

Tabela 13 – RMSE entre os resultados das simulações e os valores medidos de velocidade do vento

	VV10_AVG	VV10_MAX
SimMetA	2,85	2,46
SimMetB	3,87	3,23
SimMetC	3,78	3,23

Tabela 14 - SKILL_R entre os resultados das simulações e os valores medidos de velocidade do vento

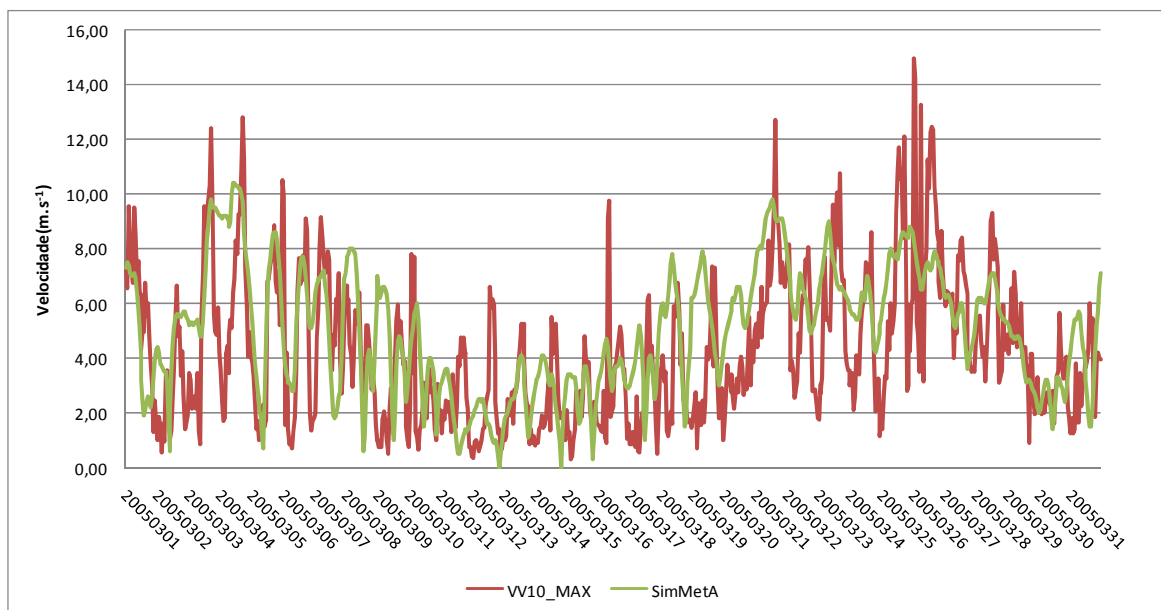
	VV10_AVG	VV10_MAX
SimMetA	0,94	0,59
SimMetB	1,28	0,77
SimMetC	1,25	0,77

Tabela 15 - Correlação entre os resultados das simulações e os valores medidos de velocidade do vento

	VV10_AVG	VV10_MAX
SimMetA	0,53	0,56
SimMetB	0,50	0,54
SimMetC	0,39	0,44

Mais uma vez se observa que os melhores valores correspondem à simulação SimMetA, que foi realizada usando os valores por defeito do TAPM. Ao contrário da Temperatura, neste caso, já se observa uma pequena diferença entre os valores dos indicadores estatísticos relativos à velocidade máxima e à média horária, sendo que os melhores valores são os relativos à medição máxima da velocidade do vento e não à média horária.

Existem também valores de $SKILL_R$ para as simulações SimMetB e SimMetC que, por serem superiores a 1 (valores marcados a vermelho), indicam que nestes casos o modelo produziu estimativas menos próximas da realidade. A análise dos gráficos que constam nas Figuras 12, 13 e 14, permite verificar um comportamento dos resultados do modelo muito semelhante ao seguido pela velocidade do vento, medida aos 10 metros de altura, conseguindo inclusivamente prever alguns picos.

**Figura 12 - Comparação entre a Simulação SimMetA e a velocidade medida do vento a 10 metros**

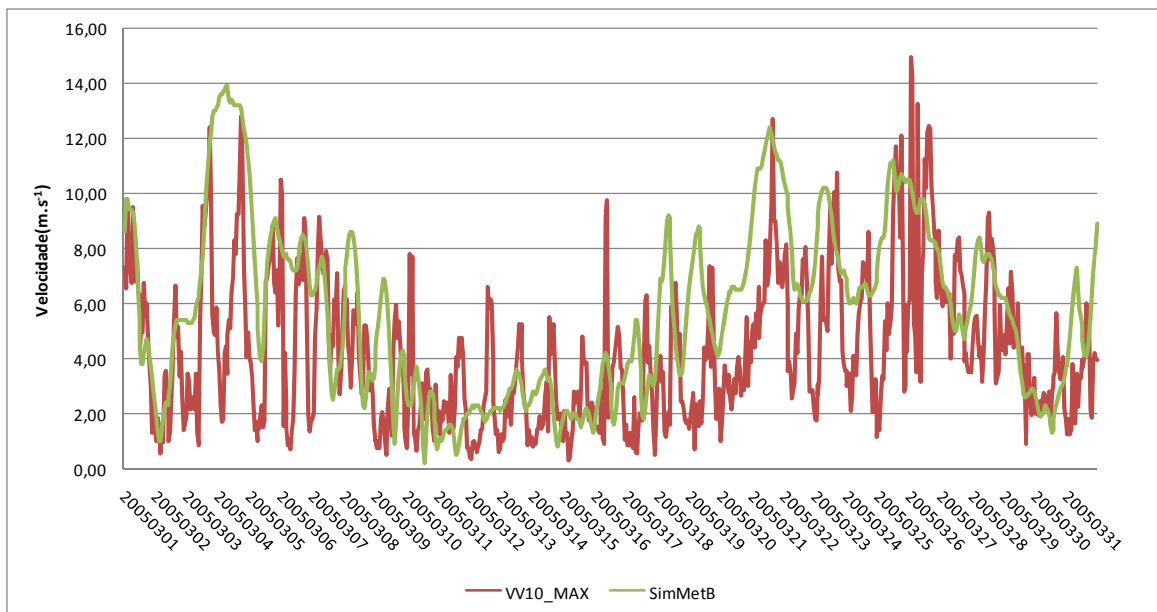


Figura 13 - Comparação entre a Simulação SimMetB e a velocidade medida do vento a 10 metros

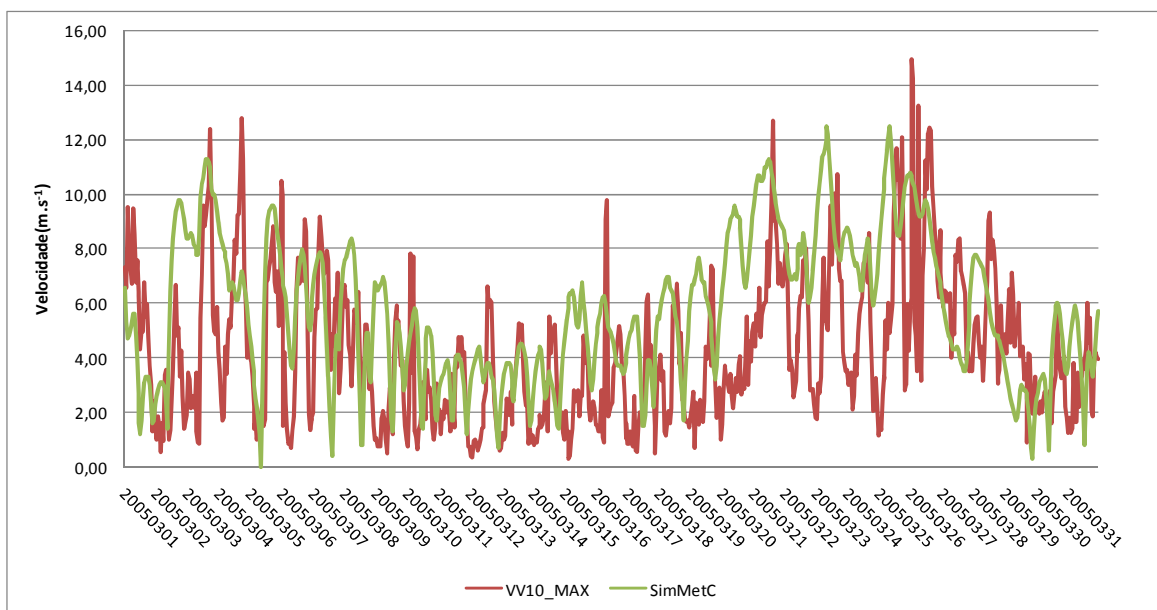


Figura 14 - Comparação entre a Simulação SimMetC e a velocidade medida do vento a 10 metros

- **Direcção do Vento**

Efectuou-se também a comparação entre os valores de direcção do vento estimados pelo TAPM e os valores medidos pela estação meteorológica da Universidade de Aveiro, mais uma vez para a altura de 10 metros. Os valores

obtidos para os parâmetros estatísticos são apresentados nas Tabelas 16, 17, 18 e 19.

Tabela 16 – IOA entre os resultados das simulações e os valores medidos de direcção do vento

	Direcção Vento a 10 m (graus)
SimMetA	0,73
SimMetB	0,64
SimMetC	0,72

Tabela 17 - RMSE entre os resultados das simulações e os valores medidos de direcção do vento

	Direcção Vento a 10 m (graus)
SimMetA	92,99
SimMetB	109,18
SimMetC	96,79

Tabela 18 - SKILL_R entre os resultados das simulações e os valores medidos de direcção do vento

	Direcção Vento a 10 m (graus)
SimMetA	0,54
SimMetB	0,63
SimMetC	0,56

Tabela 19 - Correlação entre os resultados das simulações e os valores medidos de direcção do vento

	Direcção Vento a 10 m (graus)
SimMetA	0,49
SimMetB	0,32
SimMetC	0,47

Os melhores valores em todos os parâmetros correspondem novamente à simulação SimMetA e têm alguma proximidade aos valores óptimos. Comparando com outros trabalhos em que também se usou o TAPM, como o de Ribeiro (2005) e o de Calado e Sá (2007), pode constatar-se que os valores dos parâmetros estatísticos (IOA e SKILL_R) são muito próximos, mostrando que em todos os casos, o TAPM tem uma elevada capacidade de simulação da componente atmosférica. Os gráficos das Figuras 15, 16 e 17 mostram os valores pontuais de direcção do vento em cada hora, para todos os dias do mês de Março de 2005.

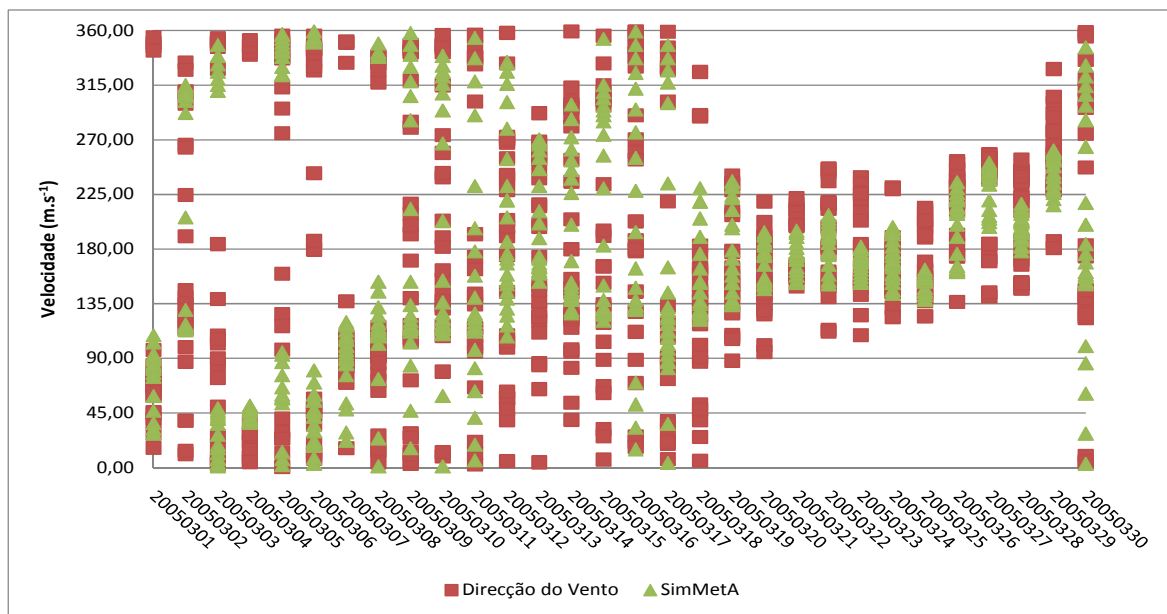


Figura 15 - Comparação entre a Simulação SimMetA e a direcção real do vento a 10 metros

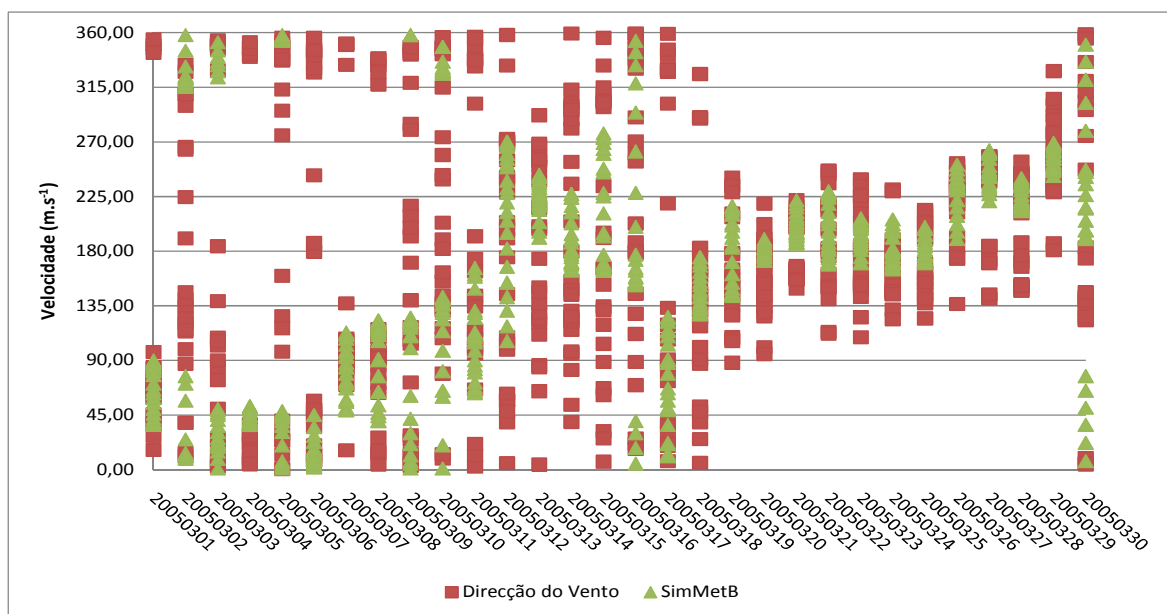


Figura 16 - Comparação entre a Simulação SimMetB e a direcção real do vento a 10 metros

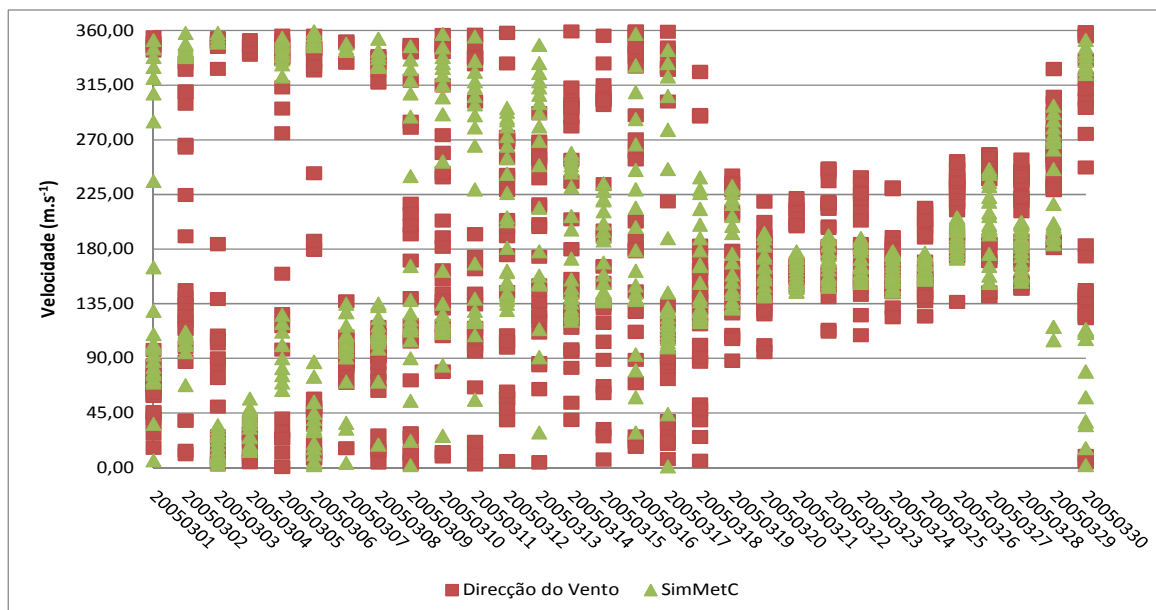


Figura 17 - Comparação entre a Simulação SimMetC e a direcção real do vento a 10 metros

Através da análise das Figuras 15, 16 e 17, pode mais uma vez constatar-se que o modelo simula a direcção do vento de forma muito aceitável, apesar de existirem algumas variações que este não é capaz de prever, variações essas que, como já foi referido, influem negativamente no cálculo dos parâmetros estatísticos, com particular incidência sobre o RMSE, dado que este parâmetro é usado para medir as diferenças existentes entre os valores dados pelo modelo e os valores medidos.

4.2.3. Validação da Corrida Anual Completa de Meteorologia

Dado que a SimMetA foi a simulação que apresentou quase sempre os valores mais próximos dos valores óptimos, logo melhor ajuste com a realidade, fez-se uma simulação da meteorologia para todo o ano de 2005 (8760 horas), usando os valores por defeito do TAPM. De seguida essa simulação foi validada fazendo a comparação dos seus resultados com os valores medidos na Estação Meteorológica da Universidade de Aveiro, a 10 metros de altura, conforme se pode observar nas Tabelas 20, 21 e 22.

Tabela 20 – Comparação entre os valores de Temperatura (°C) obtidos pelo TAPM e os medidos

	TA10_AVG
IOA	0,95
RMSE	11,42
SKILL_R	0,76
Correlação	0,91

Tabela 21 – Comparação entre os valores de Velocidade do vento (m.s⁻¹) obtidos pelo TAPM e os medidos

	VV10_AVG
IOA	0,63
RMSE	2,67
SKILL_R	0,88
Correlação	0,61

Tabela 22 – Comparação entre os valores de Direcção do vento (graus) obtidos pelo TAPM e os valores medidos

	Direcção Vento a 10 m (graus)
IOA	0,77
RMSE	110,76
SKILL_R	0,57
Correlação	0,56

Analisando as Tabelas 20, 21 e 22, constata-se que os valores obtidos pelo TAPM para um ano completo de simulação, em termos de Temperatura, estão muito próximos da realidade, dado que os valores dos parâmetros estatísticos estão muito próximos dos valores óptimos. Em termos de Velocidade do Vento, os valores são também muito bons, no entanto, quanto à Direcção do Vento, pode novamente notar-se uma maior discrepância no caso do RMSE. Fazendo a comparação com os valores de IOA e SKILL_R calculados por Ribeiro (2005) e Calado e Sá (2007), mais uma vez se observa que os valores obtidos são aproximados aos destes trabalhos. Não é possível comparar directamente o RMSE, pois não são apresentados valores deste indicador nos estudos referidos, mas uma vez que este parâmetro faz parte do cálculo do SKILL_R e que os valores

deste são muito aproximados quando comparamos os três trabalhos, revelando que o valor do RMSE, apesar de elevado, está dentro do aceitável.

O facto de os valores dos parâmetros estatísticos estarem perto dos valores óptimos, evidencia um bom desempenho do modelo, relativamente à simulação meteorológica.

5. Resultados

5.1. Componente de Poluição Atmosférica

Após a selecção da melhor simulação da componente de meteorologia, foram realizadas várias simulações para a Poluição Atmosférica, variando algumas condições de entrada.

Foram realizadas seis simulações com a alteração de diferentes parâmetros iniciais (Tabela 23), fazendo-se depois uma média dos resultados de todas as corridas, obtendo um novo grupo de resultados a que foi dado o nome de “*Ensembling*”, apesar de não ser um verdadeiro *ensemble*, mas sim uma aproximação simplificada ao conceito.

Tabela 23 - Simulações de Poluição e definições iniciais utilizadas

Simulação	Definições iniciais utilizadas
Simulação 1	Simulação efectuada com os valores por defeito do TAPM
Simulação 2	Simulação efectuada alterando os valores das concentrações de fundo dos poluentes considerados
Simulação 3	Opção “Prognostic Pollutant Concentration Variance Equation”
Simulação 4	Opção “Prognostic Temperature- Pollutant Cross-Correlation Equation”
Simulação 5	Número de níveis de mistura de emissões igual a 20
Simulação 6	Simulação usando as definições das simulações 2,3,4 e 5
ENSEMBLING	Média dos resultados obtidos nas simulações anteriores

Os poluentes escolhidos para serem simulados pelo modelo foram: Partículas PM₁₀ (APM), Ozono (O₃), Dióxido de Azoto (NO₂) e Óxidos de Azoto (NO_x)., dado que essa é uma das opções de simulação de poluentes fornecida pelo TAPM e a que foi escolhida para a realização deste trabalho.

A comparação entre os resultados dessas simulações e os valores medidos foi efectuada recorrendo aos seguintes parâmetros estatísticos:

- MAE – Mean Absolute Error (Erro Sistemático Médio);
- IOA – Index of Agreement (Índice de Concordância);
- Fractional Bias;
- A_u – Precisão do maior valor calculado (%).

Estes parâmetros já foram utilizados noutros estudos realizados com o TAPM (e.g. Ribeiro, 2005; Borrego et al., 2008; Luhar e Hurley, 2004), para validação da componente de qualidade do ar. Fazem parte de uma metodologia utilizada pela EPA para avaliação do desempenho deste tipo de modelos (EPA, 1991).

As equações dos referidos parâmetros são:

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |P_i - O_i| \quad (16)$$

$$Fractional\ Bias = \frac{O_{médio} - P_{médio}}{0,5 \cdot (O_{médio} + P_{médio})} \quad (17)$$

$$A_u = \frac{P_{máx} - O_{máx}}{O_{máx}} \times 100 \quad (18)$$

Onde:

O_i – valores medidos;

$O_{médio}$ – média dos valores medidos;

$O_{máximo}$ – máximo dos valores medidos;

P_i – valores estimados;

$P_{médio}$ – média dos valores estimados;

$P_{máximo}$ – máximo dos valores estimados;

N – Número de valores.

A equação do IOA já foi explicada no ponto 4.2 (equação 12).

O MAE é usado para demonstrar quão próximas as previsões de um modelo são dos valores medidos, representando a diferença média existente entre os valores previstos e os medidos. É menos sensível a valores extremos do que o RMSE, dado que este parâmetro evita a exponenciação. Pode assumir valores de 0 a infinito, sendo que os valores mais próximos de 0 indicam melhores previsões.

O Fractional Bias é um valor da diferença existente entre os valores estimados e medidos. No entanto, pode ser influenciado por valores elevados, previstos ou observados. Varia entre -2 e 2, sendo que valores inferiores a zero indicam que os valores estimados são superiores aos medidos, e o zero (0) representa o valor ótimo (Borrego *et al.*, 2008).

A precisão do maior valor calculado expressa a capacidade do modelo para estimar os valores de pico observados. Varia de 0 a 100%, sendo o melhor valor 100%. Na Tabela 24 é apresentado um resumo dos parâmetros descritos anteriormente.

Tabela 24 - Gama de valores possíveis e valores ótimos dos parâmetros estatísticos

Parâmetro	Gama de valores possíveis	Valores ótimos
MAE	$[0 ; \infty]$	0 (valores mais baixos são melhores)
Fractional Bias	$[-2 ; 2]$	0
A_u	$[0 ; 100]$	100%

Os resultados das diferentes simulações foram retirados nas células do domínio que contêm os pontos correspondentes às três estações de monitorização de poluentes consideradas:

- Aveiro (estação urbana de tráfego);
- Ílhavo (estação suburbana de fundo);
- Estarreja (estação suburbana industrial).

O TAPM fornece três tipos de resultados:

- CONC – concentração na célula de cálculo seleccionada;
- CMAX – concentração máxima na grelha;
- CLOC – concentração local máxima numa sub-grelha de 5 x 5 centrada

no ponto seleccionado. Os resultados são médias horárias.

Dado que interessa comparar os valores dados pelo TAPM com os valores medidos nas diferentes estações de monitorização, deve fazer-se a comparação com os valores de concentração na célula de cálculo correspondente à localização de cada estação (CONC). No Anexo C, são apresentadas tabelas onde se faz a comparação entre todos os tipos de resultados dados pelo TAPM.

A comparação foi efectuada entre os valores dados pelo TAPM e os medidos nas diferentes estações para os quatro poluentes (Partículas PM₁₀ (APM), Ozono (O₃), Dióxido de Azoto (NO₂), Óxidos de Azoto (NO_x)).

É de referenciar que, nas estações de monitorização, não foram realizadas medições em todas as horas do ano de 2005, pelo que as mesmas não foram incluídas na comparação.

Na Tabela 25 é exposto o número total de dados incluídos e a sua percentagem em relação ao número total de horas do ano.

Tabela 25 – Número total de dados e respectivas percentagens

	Aveiro		Estarreja		Ílhavo	
	nº dados	%	nº dados	%	nº dados	%
PM10	8400	95,9	8724	99,6	6966	79,5
O3	0	0,0	8725	99,6	7167	81,8
NO2	8354	95,4	8737	99,7	7492	85,5
NOX	8354	95,4	8735	99,7	7492	85,5

No caso das Partículas (PM₁₀), Dióxido de Azoto (NO₂) e Óxidos de Azoto (NO_x), para que os dados sejam representativos, a percentagem tem de ser superior a 90%. As estações de Aveiro e Estarreja têm uma percentagem de dados superior

ao necessário para serem considerados válidos (95,9% e 99,6%, respectivamente). Já a estação de Ílhavo, tem valores de percentagem inferiores (79,5%) ao legislado (Decreto-Lei nº 111/2002).

No caso do Ozono, os critérios de validade do Decreto-Lei nº 320/2003 exigem que a percentagem seja superior a 75%. A estação de Aveiro não possui dados de medições de Ozono, mas as estações de Ílhavo e Estarreja têm percentagens superiores ao exigido (81,8% e 99,6%, respectivamente).

5.1.1. Partículas

Nas Tabelas 26, 27 e 28 apresentam-se os valores dos parâmetros estatísticos calculados para as diferentes simulações e para as três estações de monitorização. Os valores a verde são os que estão mais próximos dos valores óptimos.

- **Aveiro**

Tabela 26 – Comparação entre os valores de Partículas obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Aveiro

		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bías
CONC ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulação 1	29,67	37,86	0,40	0,31
	Simulação 2	30,78	29,12	0,34	-0,38
	Simulação 3	29,68	37,86	0,41	0,31
	Simulação 4	29,67	37,86	0,40	0,31
	Simulação 5	35,77	95,62	0,41	1,75
	Simulação 6	18,57	76,70	0,31	0,22
	Ensembling	23,06	55,42	0,41	0,28

- **Estarreja**

Tabela 27 - Comparação entre os valores de Partículas obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Estarreja

		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
CONC ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulação 1	33,80	56,38	0,42	1,37
	Simulação 2	24,02	49,48	0,26	0,13
	Simulação 3	33,88	56,38	0,42	1,37
	Simulação 4	33,80	56,38	0,42	1,37
	Simulação 5	38,49	94,92	0,42	1,79
	Simulação 6	23,24	71,93	0,31	0,30
	Ensembling	27,65	68,28	0,42	0,91

- **Ílhavo**

Tabela 28 - Comparação entre os valores de Partículas obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Ílhavo

		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
CONC ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulação 1	22,06	30,48	0,42	0,01
	Simulação 2	32,78	49,47	0,36	-0,67
	Simulação 3	22,04	30,48	0,42	0,01
	Simulação 4	17,52	30,48	0,42	0,01
	Simulação 5	24,94	91,67	0,42	1,64
	Simulação 6	16,02	51,36	0,26	-0,11
	Ensembling	14,18	5,39	0,44	-0,03

Fazendo a comparação entre os vários parâmetros estatísticos obtidos pelas diferentes simulações nas três estações de monitorização, pode-se observar que os melhores valores para o IOA são sempre para o *Ensembling* e próximos do valor de 0,5, o que mostra uma boa concordância entre os valores estimados e os medidos. Em relação ao A_u , este é sempre melhor para a simulação 5, o que indica ser esta a que melhor estima os valores de pico. Já em termos do MAE, os melhores valores são relativos à simulação 6, excepto no caso de Ílhavo em que o melhor valor é o do *Ensembling*.

Quanto ao Fractional Bias, os melhores valores têm alguma flutuação. O facto de este ser positivo na grande maioria das estações revela que o modelo está a subestimar as emissões.

Os valores dos parâmetros são muito semelhantes para todas as estações, no entanto, são maioritariamente melhores para a estação de Ílhavo, o que pode ser explicado por esta ser uma estação suburbana de fundo, que caracteriza a zona urbana em causa sem a influência directa de fontes emissoras significativas.

5.1.2. Ozono

Nas tabelas 29 e 30 apresentam-se os valores dos parâmetros estatísticos calculados para as diferentes simulações e para as estações de monitorização de Estarreja e Ílhavo. Os resultados relativos ao ozono para a zona de Aveiro não foram considerados pois nesta estação de tráfego não existiam medições para efectuar a comparação.

- **Estarreja**

Tabela 29 - Comparação entre os valores de Ozono obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Estarreja

		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
CONC ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulação 1	29,16	61,79	0,47	0,42
	Simulação 2	54,29	21,58	0,47	-0,62
	Simulação 3	29,16	61,79	0,47	0,42
	Simulação 4	29,16	61,79	0,47	0,42
	Simulação 5	28,24	81,97	0,36	0,30
	Simulação 6	60,24	28,05	0,44	-0,68
	Ensembling	26,13	53,68	0,57	-0,10

- Ílhavo

Tabela 30 - Comparação entre os valores de Ozono obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Ílhavo

		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
CONC ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Simulação 1	27,77	50,70	0,57	0,53
	Simulação 2	52,11	1,49	0,53	-0,64
	Simulação 3	27,77	50,70	0,57	0,53
	Simulação 4	27,77	50,70	0,57	0,53
	Simulação 5	27,27	78,33	0,34	0,26
	Simulação 6	65,77	10,72	0,44	-0,77
	Ensembling	18,26	41,07	0,70	-0,11

Analisando as Tabelas 29 e 30, observa-se que os valores dos parâmetros estatísticos obtidos quando se efectua a comparação dos resultados para o ozono com os valores medidos, se apresentam mais próximos dos valores óptimos. Este facto pode ser explicado devido ao facto de as concentrações de ozono serem calculadas pela TAPM a partir das concentrações dos poluentes seus precursores. Todos os parâmetros têm os seus melhores valores para o *Ensembling*, excepto o A_u que tem os melhores valores relativos à simulação 5, como já havia acontecido no caso das partículas, o que mostra, mais uma vez, que esta é a simulação com maior capacidade para calcular os valores de pico, talvez devido ao facto de, nesta simulação, se fazer a mistura das emissões através de 20 níveis verticais. De notar também que os valores do IOA são superiores a 0,5, o que evidencia uma elevada concordância entre os valores medidos e estimados.

5.1.3. NO₂

- Aveiro**

Tabela 31 - Comparação entre os valores de NO₂ obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Aveiro

		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
CONC (µg/m ³)	Simulação 1	19,80	60,97	0,44	0,50
	Simulação 2	24,42	26,29	0,36	-0,26
	Simulação 3	19,80	60,97	0,44	0,50
	Simulação 4	19,80	60,97	0,44	0,50
	Simulação 5	27,30	99,01	0,40	1,94
	Simulação 6	18,62	93,24	0,40	0,88
	Ensembling	17,91	73,02	0,41	0,52

- Estarreja**

Tabela 32 - Comparação entre os valores de NO₂ obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Estarreja

		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
CONC (µg/m ³)	Simulação 1	19,37	62,07	0,44	1,10
	Simulação 2	14,71	21,16	0,41	0,26
	Simulação 3	19,37	62,07	0,44	1,10
	Simulação 4	19,37	62,07	0,44	1,10
	Simulação 5	24,56	98,55	0,43	1,97
	Simulação 6	16,08	88,76	0,44	0,79
	Ensembling	17,58	68,05	0,44	0,97

- Ílhavo

Tabela 33 - Comparação entre os valores de NO₂ obtidos pelo TAPM e os valores medidos da estação de Ílhavo

		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
CONC (µg/m ³)	Simulação 1	11,42	43,20	0,54	0,20
	Simulação 2	16,43	42,92	0,39	-0,53
	Simulação 3	11,42	43,20	0,54	0,20
	Simulação 4	11,42	43,20	0,54	0,20
	Simulação 5	15,41	98,13	0,41	1,93
	Simulação 6	8,92	86,68	0,37	0,40
	Ensembling	8,12	56,52	0,54	0,21

Observando as Tabelas 31, 32 e 33, no caso do NO₂, há uma grande variação dos melhores valores dos parâmetros estatísticos. Os valores do MAE são melhores para o caso do *Ensembling*, excepto para a estação de Estarreja em que o melhor valor corresponde à simulação 2, no entanto, os valores estão próximos. Em relação ao IOA, os melhores valores são também para o *Ensembling* excepto no caso de Aveiro em que o melhor valor é o da simulação 2, mas, mais uma vez, a diferença entre os valores não é muito grande. A simulação 5 é a que melhor estima os valores de pico, dado que é sempre a que tem os melhores valores para o A_u.

5.1.4. NO_x

- Aveiro

Tabela 34 - Comparação entre os valores de NO_x obtidos pelo TAPM e os valores reais da estação de Aveiro

		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
CONC (µg/m ³)	Simulação 1	37,40	83,00	0,30	0,54
	Simulação 2	37,04	77,72	0,29	-0,97
	Simulação 3	37,40	83,00	0,30	0,54
	Simulação 4	37,40	83,00	0,30	0,54
	Simulação 5	44,07	99,70	0,34	1,96
	Simulação 6	34,40	98,16	0,32	1,59
	Ensembling	33,01	87,79	0,29	-0,23

- Estarreja

Tabela 35 - Comparação entre os valores de NO_x obtidos pelo TAPM e os valores reais da estação de Estarreja

		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
CONC (µg/m ³)	Simulação 1	35,32	58,02	0,40	1,29
	Simulação 2	14,71	21,16	0,37	0,68
	Simulação 3	35,32	58,02	0,40	1,29
	Simulação 4	35,32	58,02	0,40	1,29
	Simulação 5	41,89	99,49	0,42	1,98
	Simulação 6	32,54	95,75	0,41	1,15
	Ensembling	33,76	69,75	0,40	1,24

- Ílhavo

Tabela 36 - Comparação entre os valores de NO_x obtidos pelo TAPM e os valores reais da estação de Ílhavo

		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
CONC (µg/m ³)	Simulação 1	15,22	42,98	0,47	0,14
	Simulação 2	17,75	26,11	0,41	-0,41
	Simulação 3	15,22	42,98	0,47	0,14
	Simulação 4	15,22	42,98	0,47	0,14
	Simulação 5	18,58	99,03	0,40	1,93
	Simulação 6	11,40	93,26	0,35	0,52
	Ensembling	10,60	58,82	0,47	0,24

Em termos do NO_x, observando as Tabelas 34, 35 e 36, vê-se que os melhores valores para o A_u são os da simulação 5, como ocorreu para todos os outros poluentes e estações de medição. Em termos do IOA, para este poluente, os melhores valores são também a simulação 5, à excepção da estação de Ílhavo, em que há outras simulações com o mesmo valor.

O MAE tem os melhores valores no caso do *Ensembling* excepto para o caso de Estarreja, enquanto o Fractional Bias varia entre as várias simulações.

5.2. Comparação com a Legislação

Por último, efectuou-se uma comparação entre os valores estimados e os valores medidos com base nos parâmetros fixados pela legislação nacional, apresentadas no capítulo 2 (Tabelas 2 e 3).

5.2.1. Partículas

Tabela 37 – Número de dias com excedências ao Valor-Limite diário de partículas para protecção da saúde humana

	Estação	SimPol1	SimPol2	SimPol3	SimPol4	SimPol5	SimPol6	Ensembling	Dados QualAr
CONC (ug/m ³)	Aveiro	40	198	40	40	0	1	18	77
	Estarreja	0	6	0	0	0	1	0	105
	Ílhavo	13	172	13	13	0	0	5	28

Tabela 38 – Média anual de partículas ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)

	Estação	SimPol1	SimPol2	SimPol3	SimPol4	SimPol5	SimPol6	Ensembling	Dados QualAr
CONC ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Aveiro	28	56	28	28	3	31	29	38
	Estarreja	8	36	8	8	2	30	15	41
	Ílhavo	27	56	27	27	3	31	29	28

A Tabela 37 indica o número de dias em que a média diária da concentração de partículas excedeu o valor limite de concentração de partículas de $50 \mu\text{g}/\text{m}^3$ mais de 7 vezes durante um ano civil, conforme indicado na legislação. Pode ver-se que a simulação 2, sobrestimou largamente os dados medidos enquanto as simulações 5 e 6 os subestimaram.

Na Tabela 38 é possível visualizar os valores da média anual de partículas, sendo aqueles que excedem o valor limite anual para protecção da saúde humana apresentados a cor vermelha.

5.2.2. Ozono

Tabela 39 – Número de excedências ao limiar de informação

		SimPol1	SimPol2	SimPol3	SimPol4	SimPol5	SimPol6	Ensembling	Dados QualAr
CONC($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Estarreja	0	1114	0	0	0	1355	0	32
	Ílhavo	0	814	0	0	0	1247	0	14

Tabela 40 – Número de excedências ao limiar de alerta

		SimPol1	SimPol2	SimPol3	SimPol4	SimPol5	SimPol6	Ensembling	Dados QualAr
CONC($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	Estarreja	0	14	0	0	0	0	0	6
	Ílhavo	0	13	0	0	0	0	0	2

Analisando as Tabelas 39 e 40, pode constatar-se que as simulações 2 e 6 (simulações em que foram inseridos valores para as concentrações de fundo) sobrestimam largamente o número de excedências aos limiares de informação e alerta, quando comparados com o número de excedências dos valores medidos nas estações de monitorização. Os valores dos números das excedências medidos nas estações de monitorização de qualidade do ar, podem ser consultados na base de dados online sobre Qualidade do Ar da Agência Portuguesa do Ambiente (URL1).

Em 2005 foram registadas 900 horas em que os níveis de Ozono ao nível do solo estiveram acima do limiar de informação ao público (em todo o país) (URL6).

5.2.3. NO₂

Tabela 41 - Valor limite horário para protecção da saúde humana

	Estação	SimPol1	SimPol2	SimPol3	SimPol4	SimPol5	SimPol6	Ensembling	Dados QualAr
CONC (ug/m ³)	Aveiro	0	0	0	0	0	0	0	8
	Estarreja	0	0	0	0	0	0	0	0
	Ílhavo	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabela 42 – Média anual de NO₂ (µg/m³)

	Estação	SimPol1	SimPol2	SimPol3	SimPol4	SimPol5	SimPol6	Ensembling	Dados QualAr
CONC (ug/m ³)	Aveiro	17	36	17	17	0	11	16	28
	Estarreja	7	19	7	7	0	11	9	25
	Ílhavo	13	27	13	13	0	10	13	16

A Tabela 41 mostra o número de horas em que houve excedências ao valor limite horário para protecção da saúde humana de 200 µg/m³. Pode ver-se que neste caso o modelo obteve resultados semelhantes aos valores medidos.

No caso da Tabela 42, pode observar-se que o modelo também se manteve muito aproximado dos valores médios anuais medidos nas estações de monitorização.

No caso do valor do limiar de alerta para o NO₂, que não pode ser superior a 400 µg/m³ medidos em 3 horas consecutivas, este não foi atingido nenhuma vez para qualquer estação.

5.2.4. NO_x

Tabela 43 – Média anual de NO_x (µg/m³)

	Estação	SimPol1	SimPol2	SimPol3	SimPol4	SimPol5	SimPol6	Ensembling	Dados QualAr
CONC (ug/m ³)	Aveiro	26	40	26	26	0	11	22	45
	Estarreja	9	21	9	9	0	11	10	42
	Ílhavo	16	29	16	16	0	11	15	19

De acordo com a Tabela 43, a simulação 2 foi a que teve valores de média anual mais próximos dos valores medidos, excepto para o caso de Ílhavo. A vermelho estão os valores que são superiores ao permitido na legislação.

6. Conclusões

Este trabalho visou testar uma nova técnica que tem vindo a ser desenvolvida no sentido de se aumentar a fiabilidade da modelação, diminuindo a incerteza que lhe está associada. Esta técnica denomina-se *Ensembling*.

Neste trabalho aplicou-se o modelo TAPM com o intuito de avaliar qual a sua capacidade de avaliar a qualidade do ar de duas formas distintas. Usando várias simulações individuais, ou fazendo uma aproximação ao conceito de *Ensembling* através do cálculo da média de todos os resultados das simulações individuais.

Este estudo pretende contribuir para o conhecimento da capacidade de previsão de métodos como o *Ensembling*, que procuram atenuar os erros inerentes à modelação e previsão, através do uso de vários modelos ou simulações que, com os seus pontos fortes particulares, anulem os pontos fracos dos restantes membros de um *Ensemble* de simulações.

As duas componentes do TAPM apresentaram desempenhos razoáveis em relação aos valores medidos, tendo a componente meteorológica obtido valores superiores nos parâmetros estatísticos, chegando mesmo a conseguir estimar alguns dos picos ocorridos, tanto em termos de Temperatura do Ar, como de Velocidade do Vento. No caso da Direcção, os valores do RMSE não são tão próximos do óptimo, o que mostra que este foi o parâmetro que o modelo teve mais dificuldade em simular. Comparando com as validações da componente de meteorologia efectuadas em outros trabalhos (Ribeiro, 2005; Calado e Sá, 2007), constata-se que os valores obtidos para os indicadores estatísticos são muito aproximados.

No caso da componente de poluição, os resultados obtidos pelo TAPM não estão tão próximos das medições, apesar de ainda assim, os indicadores estatísticos ainda serem razoáveis. Os melhores valores são referentes ao Ozono, o que pode ser explicado em parte por este poluente ser calculado pelo TAPM através das concentrações dos seus precursores, concentrações essas que são inseridas

no ficheiro das concentrações em grelha (*.gse), que é uma das entradas do programa. No entanto, no caso da simulação em que se fornecem valores para as concentrações de fundo ao modelo, observa-se que este sobrestima as emissões. O facto de 2005 ter sido um ano em que houve muitos casos de incêndios florestais, em número muito superior a outros anos, influenciando obviamente a emissão de poluentes para a atmosfera, pode ajudar a explicar o facto de os valores dados pelo TAPM não estarem tão próximos do real como seria de esperar, por exemplo no caso das PM_{10} , em que o modelo subestima as emissões.

Em termos do *Ensembling*, seria de esperar que este tivesse sempre os melhores valores quando comparado com os valores medidos, mas tal não sucede. No entanto, muitas vezes apresenta elevada concordância com as medições, assim como a Simulação 6, que serve também como uma tentativa de aproximação ao *Ensembling*, pois reúne as características de todas as outras simulações. Como foi referido anteriormente, nem a Simulação 6 nem o grupo de resultados denominado *Ensembling* são verdadeiros *ensembles*, mas sim aproximações ao conceito. Ainda assim, em termos do indicador estatístico Índice de Concordância, o *Ensembling* quase sempre apresenta o melhor valor, o que mostra que este grupo de resultados tem pouca variação quando comparado com os valores medidos nas estações de monitorização.

Fazendo o estudo através dos valores limite fixados na legislação, podemos observar que o modelo se aproxima muitas vezes dos valores medidos, excepto no caso do ozono, em que sobrevaloriza grandemente as emissões deste poluente. No entanto, tal acontece apenas no caso do limiar de informação ao público e não no limiar de alerta, o que mostra que o modelo sobrestima as emissões, mas não dá valores de concentrações muito superiores aos medidos (ou seja, dá vários valores acima dos $180 \mu\text{g}/\text{m}^3$, mas não acima dos $240 \mu\text{g}/\text{m}^3$).

Apesar de tudo, observa-se que o simples facto de se fazer uma média entre os valores das várias simulações propicia muitas vezes resultados com índices de concordância razoáveis, o que mostra uma boa apetência do *Ensembling* para

apresentar resultados mais próximos do observado, através do esbatimento das sub ou sobreavaliações de valores que as diferentes simulações podem produzir. No entanto, por essa mesma razão, também se observa que o *Ensembling* apresenta dificuldades para prever os valores de pico.

O *Ensembling* é, portanto, uma ferramenta que pode trazer grandes avanços à modelação, permitindo melhores estimativas das concentrações de poluentes, mesmo em situações onde não exista uma rede de monitorização instalada no terreno, o que ajuda na tomada de decisões relativas à instalação de novas fontes poluentes e no estudo de situações de emergência, o que permite conhecer antecipadamente quais os trajectos seguidos pelos poluentes no caso de situações acidentais, permitindo avisos às populações.

7. Referências

- Adeeb, F., 2004. *Evaluation of the Air Pollution Model TAPM (Version 2) for Adelaide, Case Study (17–31 December 2002)*. Environment Protection Authority South Australia. 36 pp.
- Azzi, M., Johnson, G.M. e Cope, M., 1992. *An introduction to the generic reaction set photochemical smog mechanism*. Proceedings of the 11th International Clean Air and Environment Conference, Brisbane. Clean Air Society of Australia & New Zealand.
- Borrego, C., Monteiro, A., Ferreira, J., Miranda, A.I., Costa, A.M., Carvalho, A.C., Lopes, M., 2008. *Procedures for estimation of modelling uncertainty in air quality assessment*. Environment International. 34: 613-620.
- Burmaster, D.E., Anderson, P.D., 2003. *Principle of good practice for the use of Monte Carlo techniques in human health and ecological risk assessments*. Risk Analysis. 14: 477-481.
- Calado, D. e Sá, M., 2007. *Aplicação de um modelo de qualidade do ar à zona centro litoral*. Projecto de Licenciatura em Eng. Do Ambiente. Universidade de Aveiro. Aveiro: 72pp
- Camuffo, D., 1992. *Acid rain and deterioration of monuments: How old is the phenomenon?* Atmospheric Environment, Part B. Urban Atmosphere. Volume 26. Issue 2: 241-247.
- Coutinho, M., Ribeiro, C., Borrego, C., 2007. *Avaliação dos episódios de ozono de Julho e Agosto de 2003 na Região Sul de Portugal Continental*. 9^a Conferência Nacional do Ambiente.

Coutinho, M., Ribeiro, C., Pereira, M., Borrego, C., 2004. *Simulation of the plume emitted by a municipal waste incinerator located in the Madeira Island*. Proc. of the 9th International Conference on Harmonization within the Amospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes. 2: 240-244.

Decreto-Lei nº 276/99, 23 de Julho.

Decreto-Lei nº 111/2002, 16 de Abril.

Decreto-Lei nº 320/2003, 20 de Dezembro.

Delle Monache, L., Stull, R.B., 2003. *An ensemble air quality forecast over western Europe during an ozone episode*. Atmospheric Environment. 37: 3469-3474.

Department of the Environment and Heritage (DEH), 2001. *Air Quality Forecasting for Australia's Major Cities: Final Report*. 8 pp.

Environmental Protection Agency (EPA), 1991. *Guideline for regulatory application of the Urban Airshed Model*. Research Triangle Park, N.C.: Office of Air Quality Planning and Standards; EPA report nos. EPA – 450/4-91-013.

Galmarini, S., Bianconi, R., Bellasio, R., Graziani, G., 2001. *Forecasting the consequences of accidental releases of radionuclides in the atmosphere from ensemble dispersion modeling*. Journal of Environmental Radioactivity. 57: 203–219.

Galmarini, S., Bianconi, R., Klug, W., Mikkelsen, T., Addis, R., Andronopoulos, S., Astrup, P., Baklanov, A., Bartniki, J., Bartzis, J.C., Bellasio, R., Bompay, F., Buckley, R., Bouzom, M., Champion, H., D'Amours, R., Davakis, E., Eleveld, H., Geertsema, G.T., Glaab, H., Kollax, M., Ilvonen, M., Manning, A., Pechinger, U., Persson, C., Polreich, E., Potempski, S., Prodanova, M.,

- Saltbones, J., Slaper, H., Sofiev, M.A., Syrakov, D., Sørensen, J.H., Van der Auwera, L., Valkama, I., Zelazny, R., 2004. *Ensemble dispersion forecasting - Part I: concept, approach and indicators*. Atmospheric Environment, 38: 4607-4617.
- Hirdman, D., 2006. *Sensitivity Analysis of the Mesoscale Air Pollution Model TAPM*. 80 pp.
- Hurley, P., 2005a. *The Air Pollution Model (TAPM) Version 3 – Part 1: Technical Description*. CSIRO – Atmospheric Research. 57 pp.
- Hurley, P., 2005b. *The Air Pollution Model (TAPM) Version 3 – User Manual*. CSIRO Atmospheric Research, Internal Paper No. 31. 38 pp.
- Hurley, P., Physick, W.L., Luhar, A.K., e Edwards, M., 2005. *The Air Pollution Model (TAPM) Version 3. Part 2: Summary of Some Verification Studies*. CSIRO – Marine and Atmospheric Research. 39 pp.
- Kowalczyk, E.A., Garrat, J.R., Krummel, P.B., 1991. *A soil-canopy scheme for use in a numerical model of the atmosphere – 1D stand alone model*. CSIRO Atmospheric Research Technical Paper No. 23. 56pp.
- Luhar, A., Hurley, P., 2004. *Application of a prognostic model TAPM to seabreeze flows, surface concentrations and fumigation plumes*. Environmental Modelling and Software. 19: 591-601.
- Manins, P.C., Cope, M.E., Hurley, P.J., Lee, S.H., Lilley, W., Luhar, A.K., McGregor, J.L., Noonan, J.A., Physick, W.L., 2007. *Integrated modelling systems in Australia*, CSIRO Marine and Atmospheric Research.

- Mason, S., 2004. *Exchange of ensemble products and development of multimodel ensembles recalibrating and combining ensemble forecasts*. World Meteorological Organization.
- McKeen, S., Wilczak, J., Grell, G., Djalalova, I., Peckham, S., Hsie, E.-Y., Gong, W., Bouchet, V., Menard, S., Moffet, R., McHenry, J., McQueen, J., Tang, Y., Carmichael, G.R., Pagowski, M., Chan, A., Dye, T., 2005. *Assessment of an ensemble of seven real-time ozone forecasts over Eastern North America during the summer of 2004*. Journal of Geophysics Research. 10: 110pp.
- Potempsi, S., 2006. *Application of ensemble approach to atmospheric dispersion modeling*. Models and Techniques for Health and Environmental Hazard Assessment and Management. Institute of Atomic Energy. 115-128.
- Potempsi, S., Galmarini S., Addis R., Astrup P., Bader S., Bellasio R., Bianconi R., Bonnardot F., Buckley R., D'Amours R., van Dijk A., Geertsema G., Jones A., Kaufmann P., Pechinger U., Perssonm C., Polreich E., Prodanova M., Robertson L., Sørensen J., Syrakov D., 2008. *Multi-model ensemble analysis of the ETEX-2 experiment*. Atmospheric Environment. 42: 7250-7265.
- Potempsi, S., Galmarini, S., 2008. *On the application of the "hot-run" version of the ENSEMBLE system to the ECURIE level 3 exercise*. EUR-report. 35 pp.
- Ribeiro, C., 2005. *Aplicação de um modelo meteorológico e de qualidade do ar a Portugal*. Dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para obtenção do grau de Mestre em Poluição Atmosférica.
- Ribeiro, C., 2007. O Modelo The Air Pollution Model (TAPM). Apontamentos de apoio à disciplina de Gestão de Qualidade do Ar, Departamento de Ambiente e Ordenamento. Universidade de Aveiro. Instituto de Ambiente e Desenvolvimento. IDAD. Cap. 8.

- Seinfeld, J., Pandis, S., 1998. *Atmospheric chemistry and physics. From air pollution to climate change*. John Wiley & Sons, Inc. 1326 pp.
- Stevenson, D., Dentener, F., Schultz, M., Ellingsen, K., Van Noije, T., Wild, O., Zeng, J., Amann, M., Atherton, C., Bell, N., Bergmann, D., Bey, I., Butler, T., Cofala, J., Collins, W., Derwent, R., Doherty, R., Drevet, J., Eskes, H., Fiore, A., Gauss, M., Hauglustaine, D., Horowitz, L., Isaksen, I., Krol, M., Lamarque, J., Lawrence, M., Montanaro, V., Müller, J., Pitari, G., Prather, M., Pyle, J., Rast, S., Rodriguez, J., Sanderson, M., Savage, N., Shindell, D., Strahan, S., Sudo, K., Szopa, S., 2006. *Multimodel ensemble simulations of present-day and near-future tropospheric ozone*. Journal of Geophysical Research, Vol. 111, D08301, doi:10.1029/2005JD006338.
- Van Loon, M., Vautard, R., Schaap, M., Bergström, R., Bessagnet, B., Brandt, J., Builtjes, P., Christensen, J., Cuvelier, C., Graff, G., Jonson, J., Krol, M., Langner, J., Roberts, P., Rouil, L., Stern, R., Tarrasón, L., Thunis, P., Vignati, E., White, L., Wind, P., 2007. *Evaluation of longterm ozone simulations from seven regional air quality models and their ensemble*. Atmospheric Environment, 41: 2083-2097.
- Vautard, R., Builtjes, P.H.J., Thunis, P., Cuvelier, C., Bedogni, M., Bessagnet, B., Honoré, C., Moussiopoulos, N., Pirovano, G., Schaap, M., Stern, R., Tarrasón, L., Wind, P., 2007. *Evaluation and intercomparison of Ozone and PM10 simulations by several chemistry transport models over four European cities within the CityDelta project*. Atmospheric Environment, 41: 173-188.
- Venkatran, A., Karamchandani, P., Prasad, P., Sloane, C., Saxena, P., Goldstein, R., 1997. *The development of a model to examine source-receptor relationships for visibility on the Colorado Plateau*. Journal of the Air and Waste Management Association. 47: 286-301.

Wengen Workshop on Global Change Research (WWGCR) 2005. *Climate, Climatic Change and Its Impacts on Human Health*. 15 pp.

World Health Organization Regional Office for Europe (WHO), 2002. *Environmental health indicators system update of methodology sheets*. European Centre for Environment and Health. Bonn Office.

URL1: www.qualar.org

URL2: <http://edc.usgs.gov/>

URL3: <http://dss.ucar.edu/catalogs/oceanlists/ocean.html>

URL4: <http://www.cmar.csiro.au/research/tapm/>

URL5: <http://www.bom.gov.au>

URL6: <http://www.quercus.pt>

8. Anexos

Anexo A – Tabelas de indicadores estatísticos de comparação entre os valores de temperatura medidos e do TAPM a diferentes alturas.

Anexo B – Tabelas de indicadores estatísticos de comparação entre os valores de velocidade do vento medidos e do TAPM a diferentes alturas.

Anexo C – Tabelas de indicadores estatísticos para os valores de concentração de poluentes medidos nas várias estações e os diferentes tipos de resultados obtidos com o TAPM.

Anexo A – Tabelas de indicadores estatísticos de comparação entre os valores de temperatura medidos e do TAPM a diferentes alturas.

	IOA							
Temperatura (°C)	TA02	TA02_AVG	TA10	TA10_AVG	TA20	TA20_AVG	TA30	TA30_AVG
SimMetA	0,90	0,90	0,93	0,93	0,93	0,93	0,93	0,93
SimMetB	0,75	0,75	0,84	0,84	0,84	0,84	0,85	0,85
SimMetC	0,88	0,88	0,93	0,93	0,93	0,93	0,92	0,92
Sim Ano Completo	0,91	0,91	0,95	0,95	0,95	0,95	0,95	0,95

	RMSE							
Temperatura (°C)	TA02	TA02_AVG	TA10	TA10_AVG	TA20	TA20_AVG	TA30	TA30_AVG
SimMetA	2,76	2,76	2,14	2,16	2,15	2,16	2,16	2,17
SimMetB	3,95	3,93	2,84	2,83	2,78	2,77	2,65	2,63
SimMetC	3,02	3,02	2,20	2,22	2,16	2,18	2,21	2,22
Sim Ano Completo	10,21	10,21	11,43	11,42	11,60	11,60	11,57	11,56

	SKILL _R							
Temperatura (°C)	TA02	TA02_AVG	TA10	TA10_AVG	TA20	TA20_AVG	TA30	TA30_AVG
SimMetA	0,25	0,25	0,17	0,17	0,17	0,17	0,17	0,17
SimMetB	0,36	0,36	0,22	0,22	0,22	0,21	0,20	0,20
SimMetC	0,27	0,27	0,17	0,17	0,17	0,17	0,17	0,17
Sim Ano Completo	0,76	0,76	0,76	0,76	0,77	0,77	0,76	0,76

	Correlação							
Temperatura (°C)	TA02	TA02_AVG	TA10	TA10_AVG	TA20	TA20_AVG	TA30	TA30_AVG
SimMetA	0,89	0,89	0,89	0,89	0,89	0,89	0,88	0,88
SimMetB	0,85	0,85	0,88	0,88	0,88	0,88	0,89	0,89
SimMetC	0,89	0,89	0,89	0,88	0,89	0,89	0,88	0,87
Sim Ano Completo	0,91	0,91	0,91	0,91	0,91	0,91	0,90	0,90

Anexo B – Tabelas de indicadores estatísticos de comparação entre os valores de velocidade do vento medidos e do TAPM a diferentes alturas.

	IOA					
Velocidade do Vento (m/s)	VV10_AVG	VV10_MAX	VV20_AVG	VV20_MAX	VV30_AVG	VV30_MAX
SimMetA	0,629	0,734	0,693	0,758	0,762	0,782
SimMetB	0,547	0,686	0,627	0,735	0,713	0,765
SimMetC	0,507	0,628	0,579	0,666	0,651	0,690
Sim Ano Completo	0,630	0,740	0,734	0,819	0,782	0,810

	RMSE					
Velocidade do Vento (m/s)	VV10_AVG	VV10_MAX	VV20_AVG	VV20_MAX	VV30_AVG	VV30_MAX
SimMetA	2,855	2,457	2,721	2,497	2,396	2,349
SimMetB	3,869	3,227	3,641	3,105	3,177	2,894
SimMetC	3,784	3,227	3,635	3,218	3,245	3,046
Sim Ano Completo	2,667	2,433	2,573	2,255	2,280	2,170

	SKILL _R					
Velocidade do Vento (m/s)	VV10_AVG	VV10_MAX	VV20_AVG	VV20_MAX	VV30_AVG	VV30_MAX
SimMetA	0,943	0,587	0,839	0,571	0,618	0,509
SimMetB	1,278	0,771	1,123	0,710	0,819	0,627
SimMetC	1,250	0,771	1,121	0,736	0,837	0,659
Sim Ano Completo	0,878	0,577	0,799	0,532	0,604	0,485

	Correlação					
Velocidade do Vento (m/s)	VV10_AVG	VV10_MAX	VV20_AVG	VV20_MAX	VV30_AVG	VV30_MAX
SimMetA	0,535	0,564	0,598	0,612	0,639	0,644
SimMetB	0,500	0,536	0,571	0,592	0,619	0,625
SimMetC	0,393	0,436	0,460	0,481	0,504	0,506
Sim Ano Completo	0,613	0,586	0,633	0,649	0,667	0,673

Anexo C – Tabelas de indicadores estatísticos para os valores de concentração de poluentes medidos nas várias estações e os diferentes tipos de resultados obtidos com o TAPM

- **PM₁₀**

		AVEIRO			
		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
Simulação 1	CONC(ug/m3)	29,67	37,86	0,40	0,31
	CMAX(ug/m3)	37,48	20,49	0,37	-0,29
	CLOC(ug/m3)	31,96	20,49	0,40	-0,05
Simulação 2	CONC(ug/m3)	30,78	29,12	0,34	-0,38
	CMAX(ug/m3)	49,45	144,82	0,31	-0,71
	CLOC(ug/m3)	39,51	29,56	0,34	-0,57
Simulação 3	CONC(ug/m3)	29,68	37,86	0,41	0,31
	CMAX(ug/m3)	37,46	20,49	0,37	-0,29
	CLOC(ug/m3)	31,95	20,49	0,40	-0,05
Simulação 4	CONC(ug/m3)	29,67	37,86	0,40	0,31
	CMAX(ug/m3)	37,48	20,49	0,37	-0,29
	CLOC(ug/m3)	31,96	20,49	0,40	-0,05
Simulação 5	CONC(ug/m3)	35,77	95,62	0,41	1,75
	CMAX(ug/m3)	35,03	95,08	0,41	1,69
	CLOC(ug/m3)	35,47	95,43	0,41	1,73
Simulação 6	CONC(ug/m3)	18,57	76,70	0,31	0,22
	CMAX(ug/m3)	19,55	64,71	0,27	0,11
	CLOC(ug/m3)	18,70	76,04	0,29	0,19
Ensembling	CONC(ug/m3)	23,06	55,42	0,41	0,28
	CMAX(ug/m3)	27,53	4,59	0,41	-0,17
	CLOC(ug/m3)	24,21	16,15	0,43	0,02

		ESTARREJA			
		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
Simulação 1	CONC(ug/m3)	33,80	56,38	0,42	1,37
	CMAX(ug/m3)	36,62	49,82	0,44	-0,22
	CLOC(ug/m3)	31,39	53,37	0,43	1,08
Simulação 2	CONC(ug/m3)	24,02	49,48	0,26	0,13
	CMAX(ug/m3)	49,11	204,41	0,36	-0,66
	CLOC(ug/m3)	25,80	43,64	0,28	0,00
Simulação 3	CONC(ug/m3)	33,88	56,38	0,42	1,37
	CMAX(ug/m3)	36,58	49,82	0,44	-0,22
	CLOC(ug/m3)	31,46	53,37	0,43	1,08
Simulação 4	CONC(ug/m3)	33,80	56,38	0,42	1,37
	CMAX(ug/m3)	36,62	49,82	0,44	-0,22
	CLOC(ug/m3)	31,39	53,37	0,43	1,08
Simulação 5	CONC(ug/m3)	38,49	94,92	0,42	1,79
	CMAX(ug/m3)	37,51	93,88	0,42	1,71
	CLOC(ug/m3)	38,31	94,67	0,42	1,78
Simulação 6	CONC(ug/m3)	23,24	71,93	0,31	0,30
	CMAX(ug/m3)	24,13	201,28	0,27	0,17
	CLOC(ug/m3)	23,45	69,39	0,29	0,26
Ensembling	CONC(ug/m3)	27,65	68,28	0,42	0,91
	CMAX(ug/m3)	29,24	18,63	0,47	-0,11
	CLOC(ug/m3)	26,32	65,50	0,41	0,75

		ÍLHAVO			
		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
Simulação 1	<i>CONC(ug/m3)</i>	22,06	30,48	0,42	0,01
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	37,60	125,55	0,28	-0,63
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	30,48	54,10	0,34	-0,44
Simulação 2	<i>CONC(ug/m3)</i>	32,78	49,47	0,36	-0,67
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	57,34	422,83	0,24	-1,00
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	46,94	74,05	0,29	-0,89
Simulação 3	<i>CONC(ug/m3)</i>	22,04	30,48	0,42	0,01
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	37,59	125,55	0,28	-0,63
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	30,48	54,10	0,34	-0,44
Simulação 4	<i>CONC(ug/m3)</i>	17,52	30,48	0,42	0,01
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	29,87	125,55	0,28	-0,63
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	24,21	54,10	0,34	-0,44
Simulação 5	<i>CONC(ug/m3)</i>	24,94	91,67	0,42	1,64
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	24,17	89,49	0,42	1,55
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	24,63	90,57	0,42	1,60
Simulação 6	<i>CONC(ug/m3)</i>	16,02	51,36	0,26	-0,11
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	18,25	15,18	0,22	-0,22
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	16,43	47,81	0,27	-0,14
Ensembling	<i>CONC(ug/m3)</i>	14,18	5,39	0,44	-0,03
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	22,95	97,74	0,33	-0,51
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	18,80	10,64	0,39	-0,35

- O₃

		ESTARREJA			
		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
Simulação 1	CONC(ug/m3)	29,16	61,79	0,47	0,42
	CMAX(ug/m3)	25,16	55,49	0,51	0,18
	CLOC(ug/m3)	27,23	58,44	0,45	0,30
Simulação 2	CONC(ug/m3)	54,29	21,58	0,47	-0,62
	CMAX(ug/m3)	67,53	198,20	0,41	-0,75
	CLOC(ug/m3)	59,24	19,91	0,45	-0,67
Simulação 3	CONC(ug/m3)	29,16	61,79	0,47	0,42
	CMAX(ug/m3)	25,16	55,49	0,51	0,18
	CLOC(ug/m3)	27,23	58,44	0,45	0,30
Simulação 4	CONC(ug/m3)	29,16	61,79	0,47	0,42
	CMAX(ug/m3)	25,16	55,49	0,51	0,18
	CLOC(ug/m3)	27,23	58,44	0,45	0,30
Simulação 5	CONC(ug/m3)	28,24	81,97	0,36	0,30
	CMAX(ug/m3)	26,96	76,99	0,38	0,25
	CLOC(ug/m3)	28,00	80,83	0,36	0,29
Simulação 6	CONC(ug/m3)	60,24	28,05	0,44	-0,68
	CMAX(ug/m3)	67,86	204,10	0,41	-0,75
	CLOC(ug/m3)	62,03	27,89	0,43	-0,70
Ensembling	CONC(ug/m3)	26,13	53,68	0,57	-0,10
	CMAX(ug/m3)	29,00	8,26	0,58	-0,24
	CLOC(ug/m3)	27,12	51,36	0,57	-0,16

		ÍLHAVO			
		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
Simulação 1	<i>CONC(ug/m3)</i>	27,77	50,70	0,57	0,53
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	23,78	44,65	0,54	0,12
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	25,68	48,04	0,55	0,37
Simulação 2	<i>CONC(ug/m3)</i>	52,11	1,49	0,53	-0,64
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	74,57	270,80	0,41	-0,83
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	59,13	0,99	0,48	-0,71
Simulação 3	<i>CONC(ug/m3)</i>	27,77	50,70	0,57	0,53
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	23,78	44,65	0,54	0,12
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	25,68	48,04	0,55	0,37
Simulação 4	<i>CONC(ug/m3)</i>	27,77	50,70	0,57	0,53
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	23,78	44,65	0,54	0,12
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	25,68	48,04	0,55	0,37
Simulação 5	<i>CONC(ug/m3)</i>	27,27	78,33	0,34	0,26
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	25,80	71,39	0,36	0,20
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	26,99	77,29	0,34	0,25
Simulação 6	<i>CONC(ug/m3)</i>	65,77	10,72	0,44	-0,77
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	74,02	5,91	0,41	-0,83
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	66,78	10,36	0,43	-0,78
Ensembling	<i>CONC(ug/m3)</i>	18,26	41,07	0,70	-0,11
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	23,71	34,62	0,61	-0,33
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	19,56	39,54	0,66	-0,19

- **NO₂**

		AVEIRO			
		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
Simulação 1	<i>CONC(ug/m3)</i>	19,80	60,97	0,44	0,50
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	18,99	57,70	0,47	0,21
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	19,05	57,92	0,46	0,26
Simulação 2	<i>CONC(ug/m3)</i>	24,42	26,29	0,36	-0,26
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	30,96	14,79	0,34	-0,53
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	29,76	14,79	0,35	-0,49
Simulação 3	<i>CONC(ug/m3)</i>	19,80	60,97	0,44	0,50
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	18,99	57,70	0,47	0,21
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	19,05	57,92	0,46	0,26
Simulação 4	<i>CONC(ug/m3)</i>	19,80	60,97	0,44	0,50
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	18,99	57,70	0,47	0,21
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	19,05	57,92	0,46	0,26
Simulação 5	<i>CONC(ug/m3)</i>	27,30	99,01	0,40	1,94
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	27,03	98,59	0,40	1,90
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	27,09	98,75	0,40	1,91
Simulação 6	<i>CONC(ug/m3)</i>	18,62	93,24	0,40	0,88
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	17,98	37,08	0,31	0,81
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	18,39	93,07	0,40	0,85
Ensembling	<i>CONC(ug/m3)</i>	17,91	73,02	0,41	0,52
	<i>CMAX(ug/m3)</i>	17,33	68,83	0,43	0,27
	<i>CLOC(ug/m3)</i>	17,39	71,26	0,43	0,31

		ESTARREJA			
		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
Simulação 1	CONC(ug/m3)	19,37	62,07	0,44	1,10
	CMAX(ug/m3)	15,12	24,89	0,60	0,10
	CLOC(ug/m3)	17,42	56,36	0,48	0,66
Simulação 2	CONC(ug/m3)	14,71	21,16	0,41	0,26
	CMAX(ug/m3)	29,29	51,29	0,40	-0,63
	CLOC(ug/m3)	16,35	4,29	0,47	-0,04
Simulação 3	CONC(ug/m3)	19,37	62,07	0,44	1,10
	CMAX(ug/m3)	15,12	24,89	0,60	0,10
	CLOC(ug/m3)	17,42	56,36	0,48	0,66
Simulação 4	CONC(ug/m3)	19,37	62,07	0,44	1,10
	CMAX(ug/m3)	15,12	24,89	0,60	0,10
	CLOC(ug/m3)	17,42	56,36	0,48	0,66
Simulação 5	CONC(ug/m3)	24,56	98,55	0,43	1,97
	CMAX(ug/m3)	24,08	97,28	0,43	1,89
	CLOC(ug/m3)	24,46	98,46	0,43	1,95
Simulação 6	CONC(ug/m3)	16,08	88,76	0,44	0,79
	CMAX(ug/m3)	15,67	11,72	0,31	0,70
	CLOC(ug/m3)	15,93	88,61	0,44	0,77
Ensembling	CONC(ug/m3)	17,58	68,05	0,44	0,97
	CMAX(ug/m3)	14,30	44,66	0,58	0,16
	CLOC(ug/m3)	16,05	64,53	0,46	0,66

		ÍLHAVO			
		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
Simulação 1	CONC(ug/m3)	11,42	43,20	0,54	0,20
	CMAX(ug/m3)	14,30	11,67	0,49	-0,36
	CLOC(ug/m3)	13,20	17,69	0,52	-0,27
Simulação 2	CONC(ug/m3)	16,43	42,92	0,39	-0,53
	CMAX(ug/m3)	34,64	77,92	0,23	-1,02
	CLOC(ug/m3)	30,54	77,92	0,26	-0,94
Simulação 3	CONC(ug/m3)	11,42	43,20	0,54	0,20
	CMAX(ug/m3)	14,30	11,67	0,49	-0,36
	CLOC(ug/m3)	13,20	17,69	0,52	-0,27
Simulação 4	CONC(ug/m3)	11,42	43,20	0,54	0,20
	CMAX(ug/m3)	14,30	11,67	0,49	-0,36
	CLOC(ug/m3)	13,20	17,69	0,52	-0,27
Simulação 5	CONC(ug/m3)	15,41	98,13	0,41	1,93
	CMAX(ug/m3)	15,02	97,06	0,41	1,83
	CLOC(ug/m3)	15,14	97,48	0,41	1,86
Simulação 6	CONC(ug/m3)	8,92	86,68	0,37	0,40
	CMAX(ug/m3)	8,63	31,38	0,16	0,31
	CLOC(ug/m3)	8,80	86,05	0,36	0,37
Ensembling	CONC(ug/m3)	8,12	56,52	0,54	0,21
	CMAX(ug/m3)	10,85	34,92	0,48	-0,31
	CLOC(ug/m3)	9,95	43,07	0,51	-0,22

- **NO_x**

		AVEIRO			
		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
Simulação 1	CONC(ug/m3)	37,40	83,00	0,30	0,54
	CMAX(ug/m3)	39,40	75,60	0,33	-0,92
	CLOC(ug/m3)	38,92	77,15	0,33	-0,89
Simulação 2	CONC(ug/m3)	37,04	77,72	0,29	-0,97
	CMAX(ug/m3)	43,14	70,33	0,33	-0,20
	CLOC(ug/m3)	42,15	70,92	0,33	-0,16
Simulação 3	CONC(ug/m3)	37,40	83,00	0,30	0,54
	CMAX(ug/m3)	39,40	75,60	0,33	0,17
	CLOC(ug/m3)	38,92	77,15	0,33	0,22
Simulação 4	CONC(ug/m3)	37,40	83,00	0,30	0,54
	CMAX(ug/m3)	39,40	75,60	0,33	0,17
	CLOC(ug/m3)	38,92	77,15	0,33	0,22
Simulação 5	CONC(ug/m3)	44,07	99,70	0,34	1,96
	CMAX(ug/m3)	43,78	99,62	0,34	1,94
	CLOC(ug/m3)	43,84	99,64	0,34	1,94
Simulação 6	CONC(ug/m3)	34,40	98,16	0,32	1,59
	CMAX(ug/m3)	33,79	9,29	0,30	1,56
	CLOC(ug/m3)	34,13	98,12	0,32	1,58
Ensembling	CONC(ug/m3)	33,01	87,79	0,29	-0,23
	CMAX(ug/m3)	33,35	56,41	0,30	0,39
	CLOC(ug/m3)	33,13	84,17	0,30	0,43

		ESTARREJA			
		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
Simulação 1	CONC(ug/m3)	35,32	58,02	0,40	1,29
	CMAX(ug/m3)	33,63	12,72	0,46	0,11
	CLOC(ug/m3)	33,37	54,93	0,40	0,93
Simulação 2	CONC(ug/m3)	14,79	45,92	0,37	-0,29
	CMAX(ug/m3)	39,05	1,56	0,44	-0,98
	CLOC(ug/m3)	28,62	12,48	0,37	-0,79
Simulação 3	CONC(ug/m3)	35,32	58,02	0,40	1,29
	CMAX(ug/m3)	33,63	12,72	0,46	0,11
	CLOC(ug/m3)	33,37	54,93	0,40	0,93
Simulação 4	CONC(ug/m3)	35,32	58,02	0,40	1,29
	CMAX(ug/m3)	33,63	12,72	0,46	0,11
	CLOC(ug/m3)	33,37	54,93	0,40	0,93
Simulação 5	CONC(ug/m3)	41,89	99,49	0,42	1,98
	CMAX(ug/m3)	41,38	98,97	0,42	1,93
	CLOC(ug/m3)	41,78	99,44	0,42	1,97
Simulação 6	CONC(ug/m3)	32,54	95,75	0,41	1,15
	CMAX(ug/m3)	31,99	58,11	0,38	1,08
	CLOC(ug/m3)	32,37	95,69	0,41	1,14
Ensembling	CONC(ug/m3)	33,76	69,75	0,40	1,24
	CMAX(ug/m3)	30,34	3,01	0,44	0,33
	CLOC(ug/m3)	32,18	67,67	0,40	0,99

		ÍLHAVO			
		MAE	Au(%)	IOA	Frac. Bias
Simulação 1	CONC(ug/m3)	15,22	42,98	0,47	0,14
	CMAX(ug/m3)	27,26	4,88	0,31	-0,67
	CLOC(ug/m3)	24,49	10,93	0,34	-0,59
Simulação 2	CONC(ug/m3)	17,75	26,11	0,41	-0,41
	CMAX(ug/m3)	39,32	15,69	0,24	-0,97
	CLOC(ug/m3)	35,27	13,37	0,27	-0,91
Simulação 3	CONC(ug/m3)	15,22	42,98	0,47	0,14
	CMAX(ug/m3)	27,26	4,88	0,31	-0,67
	CLOC(ug/m3)	24,49	10,93	0,34	-0,59
Simulação 4	CONC(ug/m3)	15,22	42,98	0,47	0,14
	CMAX(ug/m3)	27,26	4,88	0,31	-0,67
	CLOC(ug/m3)	24,49	10,93	0,34	-0,59
Simulação 5	CONC(ug/m3)	18,58	99,03	0,40	1,93
	CMAX(ug/m3)	18,17	98,51	0,40	1,85
	CLOC(ug/m3)	18,28	98,60	0,40	1,87
Simulação 6	CONC(ug/m3)	11,40	93,26	0,35	0,52
	CMAX(ug/m3)	10,97	33,51	0,21	0,44
	CLOC(ug/m3)	11,24	92,92	0,34	0,49
Ensembling	CONC(ug/m3)	10,60	58,82	0,47	0,24
	CMAX(ug/m3)	17,17	69,93	0,37	-0,47
	CLOC(ug/m3)	15,55	38,28	0,40	-0,38